جامعة تشرين
كلية العلوم

ميكانيك الكم

الدكتور حسن سلمان
أستاذ في قسم الفيزياء

الدكتور محي الدين نظام
مدرس في قسم الفيزياء

السنة الرابعة (رف + ر ف ك)



المقدمة

لقد اكتسب علم ميكانيك الكم، منذ أن بدأ عام 1926 على يد شرودنغر ، أهمية خاصة ، وأصبح الأداة الرئيسية التي لابد منها لكشف أسرار العالم المجهري ، وقد امتدت تطبيقاته لتشمل مختلف فروع الفيزياء الحديثة وخاصة الفيزياء الذرية والنووية والجسم الصلب ، كما أصبح ضرورياً لدراسة وفهم وتفسير كثير من الحوادث الكيميائية .

ومن نافلة القول التأكيد على ضرورة الالمام بمبادىء ميكانيك الكم من قبل كل من يريد دراسة الكيمياء والفيزياء في الجامعات .

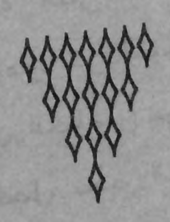
يضم الكتاب الأسس العامة لميكانيك الكم ، وقد شرحنا أولاً ، باختصار ، الأسس الفيزيائية والتجريبية التي يرتكز عليها هذا العلم، حيث أوردنا بعض الظواهر الفيزيائية التي لايستطيع الميكانيك الكلاسيكي تفسيرها ، ثم انتقلنا في الفصل الثاني الى استنتاج معادلة شرودنغر وحل بعض المسائل على أساسها . وكان لابد للتعمق في دراسة ميكانيك الكم من بناء هذا العلم على أسس رياضية بالاضافة الى الأسس الفيزيائية ولهذا تم شرح الأسس الرياضية والمسلمات الأساسية كما تم استنتاج معادلة شرودنغر من جديد بطريقة أخرى أكثر رسوخاً في الفصل الثالث ، أما في الفصل الرابع فقد تمت دراسة أحد المؤثرات الذي يؤدي دوراً كبيراً في ميكانيك الكم وهو مؤثر العزم الحركي ، مع العلم أن نتائج هذه الدراسة تعمم بشكل آلي على مؤثر آخر لايقل أهمية عنه هو مؤثر السبين أو العزم الذاتي الذي ذكرناه في فصل لاحق ، وفي الفصل الخامس شرحنا الحركة في حقل مركزي متناظر وأوردنا في نهاية الفصل بعض التطبيقات على هذه الحركة وهي دراسة الطيف الدوراني والاهتزازي لجزيء مؤلف من ذرتين . ولعل ما زاد ميكانيك الكم رسوخاً ، كفرع هام من فروع

من فروع الفيزياء ، هو نجاحه الرائع في تفسير الطيوف الذرية وبصورة خاصة طيف الهيدروجين وهذا ما ذكرناه في الفصل السادس ، مع العلم أنه كان لهذه الدراسة أثر كبير في اكتشاف نظيري الهيدروجين : الديتريوم والتريتيوم . وفي الفصل السابع درسنا حركة الالكترون في حقل مغناطيسي انطلاقاً مما يسمى مفعول زيمان ووصولاً الى سبين الالكترون . أما في الفصل الثامن فقد درسنا الجسيمات المتطابقة وأثر هذا التطابق في سلوكها والاستفادة منه في حساب توابعها الموجية ، وهذا ما يوءدي في نهاية الأمر الى مبدأ باولي ذي الأهمية القصوى في دراسة الفيرميونات . ان كثيراً من مسائل ميكانيك الكم لاتحل بطريقة دقيقة ، ولهذا كان لابد من البحث عن طرق تقريبية لحلها ذكرنامنها طريقتين أساسيتين هما طريقة W.K.B. وطريقة نظرية الاضطراب ، وهذا ما تم شرحه في الفصل التاسع .

وفي النهاية كان من الضروري ،تعميماً لميكانيك الكم اللانسبي الذي درسناه في الفصول السابقة ، التعرف على مبادىء ميكانيك الكم النسبي المبني على معادلة ديراك حيث شرحنا هذه المعادلة بالتفصيل وذكرنا بعض تطبيقاتها في الفصل العاشر مقتصرين على الحدود التي يسمح بها المنهاج المقرر .

وختاماً لنا وطيد الأمل بأن يساهم هذا الكتاب في رفع سوية طلابنا الأعزاء ويساعدهم في فهم الكثير من مواضيع الفيزياء والكيمياء .

ونكون شاكرين جميع الزملاء الذين يبدون أي ملاحظة تتعلق بهذا الكتاب .



مفردات المنهاج المقرة من قبل مجلس التعليم العالي

لمقـــــرر

ميكانيـــــــك الكـــم

لطلاب السنة الرابعة رف + ف ك   ٣ ساعات نظرية

١ – تذكرة بمسلمات ميكانيك الكم وبأداته الرياضية

٢ – تذكرة سريعة بحلول معادلة شرودنغر

٣ – حركة جسيم في حقل مركزي

٤ – عزم كمية الحركة المدارية

٥ – السبين

٦ – حركة جسيم في الحقل الكهرطيسي

٧ – مسـألة الجسيمين

٨ – نظرية الاضطراب وتطبيقاتها البسيطة

٩ – عرض موجز لميكانيك الكم النسبوي

الفصل الأول

الأسس الفيزيائية لميكانيك الكم

1 – تمهيد ، فشل الفيزياء الكلاسيكية وقصورها :

في أي فرع من فروع العلوم الفيزيائية يلاحظ أن النظرية تولد وتتطور مع التجربة ولا يشذ ميكانيك الكم ، كنظرية لدراسة الجسيمات الدقيقة ، عن هذه القاعدة ؛ فالأسس التجريبية لهذا العلم بدأت تظهر منذ مدة عندما بدأ العلماء بدراسة اشعاع الجسم الأسود والمفعول الكهرضوئي ، والمجموعات الذرية وغيرها من الأبحاث التجريبية الكثيرة التي يصعب تفصيلها هنا ولكننا في المستقبل سنحاول تعليلها بالاستناد الى نظرية الكم ، التي كانت بدون شك من أهم النظريات التي ظهرت في العصر الحديث ؛ اذ استطاعت بنجاح أن تفسر السلوك الفيزيائي للجسيمات المجهرية (الجسيمات الأساسية ، الذرات ، الذرات المضاعفة) كما أمكن استنتاج قوانين الفيزياء الكلاسيكية كحالة خاصة من فيزياء الكم .

لقد كان معلوماً قبل اكتشاف نظرية الكم أن قوانين الالكتروديناميك (التحريك الكهربائي (Electrodynamics

(وهو العلم الذي يدرس حركة الشحنات الكهربائية والحقول الكهرطيسية
الناتجة عن ذلك وتفاعلها بعضها ببعض) لايمكن أن تطبق في كثير
من الحالات،لنأخذ ، كمثال على ذلك ، حركة الالكترونات حول النواة،
فحسب قوانين التحريك الكهربائي انه عندما تتحرك شحنة فانها
تشع طاقتها باستمرار الى ان تخسر هذه الطاقة كلها ثم تسكن،
ولكننا نلاحظ أن الالكترون السالب بالرغم من أنه يدور حول
النواة الموجبة فهو لايفقد طاقته ولاينجذب نحوها، أما اذا طبقنا
على هذا الالكترون قوانين الميكانيك الكلاسيكي باعتباره يتحرك
في حقل كمون مركزي فيوتني جاذب فلا نستطيع تفسير سلوكه
الفيزيائي كما يبدو على شاشة التجربة .

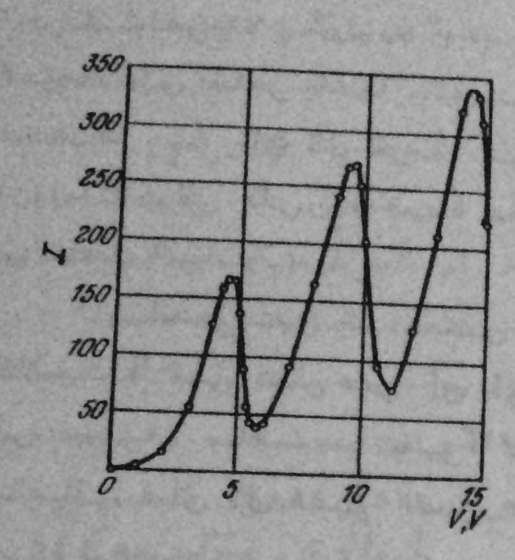
وكمثال آخر على فشل علوم الفيزياء الكلاسيكية في مجال الجسيمات
المجهرية نقول انه ، طبقاً لهذه العلوم ، لايمكن أن يكون لأي
جسيم طاقة متقطعة ولكن هذا مخالفاً للواقع كما تثبت التجربة
التالية المسماة تجربة فرانك وهيرتز

(Frank and Hertz experement)

التي اجريت سنة 1913 حيث تمرر حزمة من الالكترونات الخارجة من
مهبط ضمن حجرة تحوي على غاز ثم تستقبل على مصعد حيث يقاس
فيما بعد تيار الالكترونات الناتج فنلاحظ أنه يحوي نهايات
عظمى وصغرى تختلف مواضعها باختلاف نوع الغاز ضمن الحجرة
(الأنبوب) .

لايمكن،طبعاً،تفسير هذه التجربة على ضوء معلوماتنا في
الفيزياء الكلاسيكية ولكننا سنعطي الآن التفسير التالي لوجود
النهايات فنقول ان الالكترونات الصادرة من المهبط تصطدم اصطداماً
مرناً (Elastic, Elastique) بذرات الغاز ضمن الأنبوب فلا
تتغير طاقتها ، وبالتالي فانها تصل الى المصعد الذي يزداد تياره
بازدياد الكمون المسرع V للالكترونات الذي يعطيها طاقة eV .
وعندما نستمر في زيادة الكمون V فان الالكترونات تستطيع أن
تصطدم بالذرات وتهيجها ، أي ترفعها الى سوية طاقة أعلى مما يؤدي

الى نقص طاقة الالكترونات وعدم تمكنها من الوصول الى المصعد وهذا يوءدي الى نهاية صغرى في التيار . أما اذا استمرينا في زيادة الكمون V فان الالكترونات التي كانت قد اصطدمت مع ذرات الغاز وخسرت طاقتها تجد الوقت الكافي لكي تتسرع من جديد وتصل الى المصعد مما ينتج عنه نهاية عظمى جديدة ، ثم باستمرار زيادة الكمون يلاحظ ان هذه الالكترونات تكتسب طاقة أكبر وتستطيع تهييج ذرات جديدة مما ينتج عنه نهاية صغرى جديدة وهكذا كما في الشكل (1.1) .



شكل (1.1)
تيار الالكترونات الواصل الى المصعد بدلالة قيمة الكمون المسرع V.

تثبت هذه التجربة أن الذره تأخذ الطاقة من الخارج بشكل دفعات وليس بصورة مستمرة وهذا يعني أن للذرة نفسها طبعا طاقة متقطعة وعندما تنتقل الذرة المهيجة من سوية طاقة أعلى الى أخرى أدنى فانها تشع مقدارا من الطاقة يخرج بشكل فوتون ضوئي (جسيم طاقة) .

والحقيقة أن الطاقة ليست هي الكمية الوحيدة التي يمكن أن تأخذ قيما متقطعة فقد اثبتت تجربة شتيرن وغيرلاخ (Stern - Gerlach experement) أن مسقط العزم الحركي لجسيم على محور معين يمكن أن يأخذ قيماً متقطعة وقد برهنا على ذلك كما يلي :

من المعلوم أنه عندما تمر حزمة جسيمات مشحونة ضمن حقل مغناطيسي غير متجانس $\vec{B}$ وثابت في الاتجاه (oz مثلا) فانها تنحرف عن مسارها باعتبار أن القوة التي توءثر على الجسيم ،حسب

حيث μ_z هو مسقط قوانين التحريك الكهربائي، تساوي $\mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$ العزم المغناطيسي للجسيمات على المحور oz ، الذي يتناسب مع عزم الحركة المعروف ($\vec{L} = (\vec{r} \times m\vec{v})$)، وقد لاحظ العالمان عند استقبال الحزمة على حاجز أنها انقسمت الى عدة حزم كل منها يقابل قيمة خاصة لـ L_z أي كل حزمة تحوي مجموعة من الجسيمات التي لمسقط عزمها الحركي على oz قيمة معينة (انظر هذه التجربة بالتفصيل في الفصل السابع) .

ان التجربتين السابقتين تتعارضان بوضوح مع قوانين الفيزياء الكلاسيكية التي تنص على أن أي تغير لامتناه في الصغرفي القوة المؤثرة على مجموعة ما يسبب تغيراً لامتناهياً في الصغر في حالتها ، وبالتالي فان كل القيم الفيزيائية المرتبطة بالمجموعة كالطاقة وكمية الحركة وغيرها يجب أن تكون توابع مستمرة لحالة هذه الجملة .

ولكن ألا يظهر للجسيمات المجهرية أحياناً بعض الخواص الاستمرارية ؟ بمعنى آخر ،هل يمكن أن نجد قيماً مستمرة للطاقة ؟ الحقيقة أن بعض التجارب تثبت ذلك ؛ اذ أن دراسة طيف الطاقة الناتج عن اصطدام أشعة رونتجن في حقل نويات تثبت الخواص الاستمرارية لهذا الطيف .

2- المفهوم المضاعف الجسيمي-الموجي (المثنوية Duality):

من الظواهر التي لم تستطع الفيزياء الكلاسيكية تعليلها أيضاً هي ما لوحظ من شذوذ في سلوك الجسيمات المجهرية ، فهي تبدو في بعض التجارب كجسيمات ، ولكنها تظهر في بعضها الآخر كموجة .

فمن المعلوم في الفيزياء الكلاسيكية أن للجسيم أبعاداً لامتناهية في الصغر والنقطة المادية التي تتحرك في مسار معين هي أوضح مثال على ذلك ، ومن الممكن القول في الفيزياء الكلاسيكية أيضاً أن للموجة مفهوما معاكساً لذلك ، فللموجة المستوية (Onde Monochromatique , Monochromatic Wave) (التي لها طول موجي ثابت ومعين) امتداد ...

وبالتالي لامعنى لقولنا انها تقع في مكان محدد وأن لها مساراً معيناً ، غير أنه عندما لاتكون الموجة مستوية ،بل موءلفة من انطباق عدد من الموجات التي لكل منها تواتر محدد فانه يمكن القول انها مجمعة في مجال ما من الفراغ ، وكلما كثر عدد هذه الموجات المختلفة التواتر،صَغُرَ هذا المجال . وينطبق هذا على كل أنواع الموجات سواء أكانت موجات مرونة أم كهرطيسية أو غيرها .

أما الجسيمات المجهرية فانها تتمتع بالخاصتين السابقتين معاً ؛ فمثلاً نجد في بعض التجارب الضوئية أن الفوتونات تسلك سلوكاًموجياً تماماً اذ نحصل على تداخل أو انعراج الأمواج الضوئية ، ولكنها في تجارب أخرى " تتنكر " لصفاتها هذه كما في مفعول كومبتون مثلا : (Compton Effect , Effet de Compton)

حيث يسلك الفوتون سلوك جسيم حقيقي ؛ اذ يصطفي أحد الالكترونات من حول النواة (من الذرة) ليقتلعه ويذهب به بعيداً دون التأثير على الالكترونات الأخرى للذرة . ولايمكن أن تفسر هذه الحادثة بالسلوك الموجي للضوء اذ لو صح ذلك لما أثرت الموجة ذات الامتداد اللامتناهي على الكترون واحد فقط .ومن ذلك نستنتج أن لجسيمات الحقل الكهرطيسي ، الفوتونات الضوئية ، سلوكاً مثنوياً .

لنعتبر الخواص الجسيمية فنقول ان مجموعة النتائج التجريبية تبين أن لكلفوتون طاقة تساوي $\hbar\omega$ وكمية حركة P تساوي :

$$P = \frac{E}{c} = \frac{2\pi\hbar\nu}{c} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \frac{\hbar}{\lambdabar} \quad (1.1)$$

حيث $\omega = 2\pi\nu$ التواتر الزاوي ، أما $\lambda = \frac{c}{\nu}$ فهي طول الموجة المرتبطة بالفوتون و $\lambdabar = \lambda/2\pi$ وأخيرا فان $\hbar$ هو ثابت بلانك مقسوما على 2π أي :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054 \times 10^{-27} \text{ erg/Sec.}$$

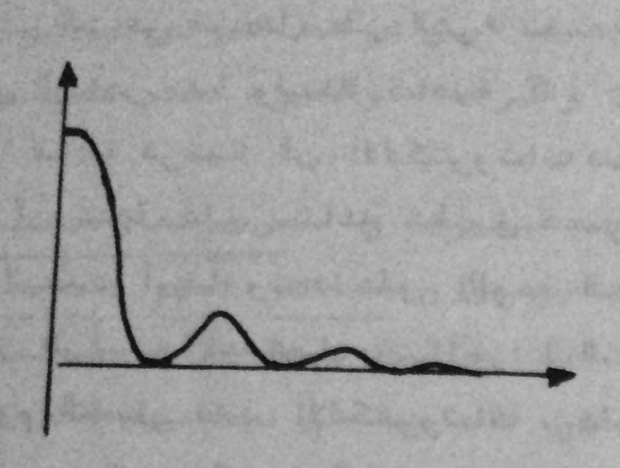
وهذا يعني أنه يرافق كل فوتون،طاقته E ، موجة طولها $\lambdabar$

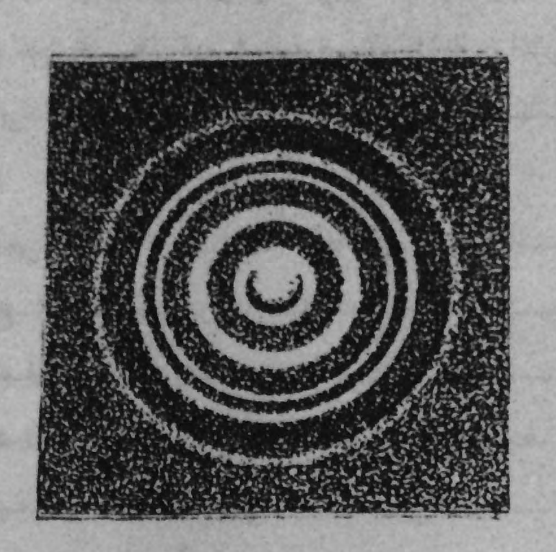
تحسب من العلاقة السابقة • والجدير بالذكر أن الازدواج السابق لم يكن فقط بالنسبة للفوتونات فهو كذلك يتحقق عند كل الجسيمات المجهرية ولكن كان من السهل ملاحظة الخواص الجسيمية أولا (ففي غرفة ويلسون مثلا عندما تمر حزمة جسيمات ضمن بخار مشبع تؤينه ويصبح كل ايون مركز تكاثف ونلاحظ الخطوط الناتجة عن ذلك بواسطة المنظار من خارج الغرفة). كذلك يلاحظ السلوك الجسيمي بسهولة في لوحات التصوير حيث تظهر بوضوح تحت المجهر آثار المسارات التي تركتها الجسيمات في اللوح الحساس وهذا ما جعل بعضهم يفكر أن للجسيمات المجهرية مسارات معينة (بالمعنى الكلاسيكي لمفهوم المسار)، الا أن التجربة التي سندرسها بعد قليل تبين خطأ هذا التفسير وتؤكد أن مفهوم المثنوية هو أحد الملامح الأساسية للجسيمات المجهرية • والجدير بالذكر أن الفيزيائيين النظريين هم أول من تنبأ بالصفات الموجية للالكترونات والبروتونات وغيرها ، مما نبه المجربين الى ضرورة اجراء تجارب للتحقق من ذلك •

3 - انعراج الالكترونات :

(Diffraction of electrons , Diffraction d'électrons)

للبرهان على السلوك الموجي للالكترونات ندرس التجربة التالية : يمرر من خلال ثقب صغير جداً في حاجز حزمة الكترونات ضيقة بقدر الامكان بحيث تمر من الثقب واحداً واحداً ان أمكن ، ثم توضع صفيحة حساسة لاستقبال الالكترونات المارة ، فاذا كان لها صفات جسيمية فقط لوجب أن نحصل على الصفيحة الحساسة على بقعة مظلمة مركزية على الحاجز يقل الظلام عليها كلما ابتعدنا عن المركز ولأمكن حساب شدة الاضاءة على الصفيحة حسب قانون الأخطاء، أي بدستور غوص ، ولكن هذا لايحدث أبداً ونجد ، بعد مرور وقت كاف ، أن هناك منطقة على اللوحة الحساسة لايمكن أن تصلها الالكترونات ثم منطقة أخرى تتوزع فيها الاضاءة بشكل حلقات مظلمة ومضيئة كما يحدث في حالة انعراج الضوء على حواف ثقب





شكل (1.2)

صورة للوحة الحساسة بعد التحميض

توزع شدة الاضاءة على الصفيحة (اللوحة الحساسة)

وفي هذا برهان واضح على أن للالكترونات صفات موجية بالاضافة الى صفاتها الجسيمية المعروفة سابقاً . اذ ان الدوائر الضوئية الملاحظة على الصفيحة الحساسة يمكن أن تعلل بالاستناد الى النظرية الموجية للضوء . وهكذا فان حركة الكترون تختلف تماماً عن حركة جسيم كلاسيكي يمر من خلال ثقب في حاجز .

قد يتبادر الى الذهن أنه يمكن تعليل التجربة السابقة كما يلي : لأسباب ما ، غير معروفة بعد ، يمكن أن تسير الالكترونات على مسارات معينة ولايمكنها أن تسير على أخرى، فلو فرضنا مثلاً أنها يمكن أن تسير على مخاريط صلبة رأسها يقع في ثقب الحاجز حيث تمر واحداً واحداً، فان تقاطع هذه المخاريط مع اللوحة الحساسة يعطي الدوائر الضوئية الملاحظة . غير أن مثل هذا التعليل غير صحيح

والتجربة التالية تثبت خطأه :

يؤخذ حاجز يحوي على ثقبين كالثقب السابق وتمرر الالكترونات من أحدهما مغلقين الآخر فنجد نتائج مشابهة لما سبق ،نغلق الاول ونفتح الثاني فنحصل على الشيء نفسه ،ولكن ماذا يحدث اذا فتحنا ثقبي الحاجز معا ولمدة كافية ؟

فاذا فرضنا أن الالكترونات تسير على مسارات معينة فانه يجب أن نحصل على نتائج تطابق مجموع النتيجتين السابقتين.ولكن هذا لايحدث أيضاً ونجد على اللوحة الحساسة شكلايشبه الانعراج عند ثقبين قريبين أحدهما من الآخر (التداخل) ، وهذا يعني أن لامعنى لمفهوم المسار عند الالكترونات ، فلها ، كما للموجات الضوئية ، صفات موجية ويمكنها أن تتداخل مكونة أهداباً مظلمة ومضيئة ولا نستطيع التحديد من أي ثقب مر الكترون ما واقع على نقطة ما من اللوحة الحساسة . وكل ما نستطيع تأكيده عند رؤية ظاهرة التداخل هو أنه يوجد على اللوحة مناطق مضيئة (لايمكن للجسيم أن يقع عليها) ومناطق مظلمة (يمكنه أن يقع عليها) .

ان التجربتين السابقتين تثبتان الخواص الموجية للالكترون ولكن ماذا عن الخواص الجسيمية له ؟ وهل يمكننا أن نطابق هذا الالكترون بموجة ما ؟ والجواب يمكن أن يستنتج مما سبق ؛ فلو كان مجرد موجة فان الصورة التي نحصل عليها بعد مرور وقت كاف ، ستكون مشابهة لما نحصل عليه بعد مرور عدد من الالكترونات في وقت قليل ، والاختلاف الوحيد سيكون في شدة اظلام المناطق المظلمة على اللوحة الحساسة ولامكننا بالقياس الى الموجة الضوئية مشاهدة الأهداب على لوحة التداخل السابقة (الانعراج عند ثقبين) ولكن هذا لايحصل ولايمكننا مشاهدة الظواهر الموجية الابعدمرور وقت كاف .ويجب التأكد هنا أن الكتروناً ما يقع على الصفيحة الحساسة في مكان يختلف تماماً عن المكان الذي يقع فيه جسم كلاسيكي مما يدل على أنه خاضع في حركته لقوانين أخرى غير قوانين الفيزياءالكلاسيكية .

وهكذا ، كما تدل التجربتان السابقتان ، تكون الخواص الموجية

موجودة عند كل الكترون ولكنها لاتظهر بصورة جيدة الا بعد مرور عدد كبير جداً منها . وهذه الخواص ، بالرغم من أنها مستنتجة بالنسبة للالكترونات ، الا انها صحيحة بالنسبة لكل الجسيمات الأساسية والمجهرية . وقد تمكن العلماء من دراسة الخواص الموجية للنترونات والبروتونات وجسيمات α وغيرها . وأخيراً نختم هذه الفقرة بالنتيجة الهامة التالية :

ان الالكترون (وكل الجسيمات المجهرية) ليس موجة وليس جسيماً بالمعنى الكلاسيكي لهذين المفهومين وانما هو جسيم يتمتع بصفات موجية خاصة به . وسنعمم النتائج التجريبية الآنفة الذكر بصورة كمية لكي نبني بعض المفاهيم الأساسية في ميكانيك الكم .

4 ـ التابع الموجي (*Wave function, Fonction d'onde*) :

رأينا في الفقرة السابقة أن للالكترون خواص موجية وهذا ما يدعونا الى التفكير بالبحث عن معادلة تفاضلية موجية من النوع الذي يطبق على جسيمات الحقل الكهرطيسي (الفوتونات) بغية دراسة الجسيمات المجهرية ، أي بمعادلة من الشكل :

$$\Box \Psi = 0 \qquad (1.2)$$

حيث $\Box$ هو موءثر دالمبير الذي يساوي :

$$\Box = \Delta - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}$$

حيث :

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

و Ψ هو التابع الموجي المطلوب ايجاده والذي ينبغي أن يصف حركة الجسيم ، وسنبحث عن شكله (بالمعنى الكلاسيكي لهذه الكلمة)

المربح بعد قليل ، أما الآن فسنفرض أنه تابع ما للأحداثيات والزمن من الشكل $\psi(x, y, z, t)$ ولنبحث، على ضوء التجارب السابقة ، ماذا يجب أن يعني ψ من الناحية الفيزيائية ؟ أوبعبارة أخرى،كيف يمكن الربط بين ψ ونتائج التجارب المذكورة سابقا ؟

لقد كان العالم بورن من أوائل الذين أجابوا على هذا السوء ال فقال ان المقدار $|\psi(x,y,z,t)|^2 dV$ يجب أن يتناسب مع القيمة التي تعطي احتمال وجود الجسيم في عنصر الحجم dV حول النقطة $M(x,y,z)$ في اللحظة t فاذا رمزنا لهذا الاحتمال بالرمز dW يكون :

$$dW \propto |\psi(x,y,z,t)|^2 dV \tag{1.3}$$

وقد استند بورن (Born) في فرضيته هذه الى ما لوحظ في تجربة الثقبين من أننا لانستطيع أن نعلم من أي ثقب مر الكترون ما ووقع على نقطة ما من الصفيحة الحساسة أو بعبارة أخرى ،يمكن للالكترون الذي مر من أحد الثقبين أن يقع في أي نقطة من الصفيحة الحساسة ، وبالتالي فان مكان وقوعه هناك خاضع لقانون الصدفة أو قانون الاحتمالات ، ولهذا فان سلوكه يجب أن يحدد بتابع ما احتمالي ، الا أن التابع $\psi(x,y,z,t)$ كحل لمعادلة موجية لايمكن أن يكون احتمالياً لأنه قد يأخذ قيمة سالبة كما قد يكون شعاعياً أو حتى عقدياً (يحوي $i=\sqrt{-1}$) ؛ بينما يجب أن يعطي الاحتمال بعدد ما حسابي ، ولكن التابع $|\psi(x,y,z,t)|^2$ يمكن أن يعطينا الاحتمال المطلوب بالاضافة الى أنه يحوي الخواص الموجية للجسيم من خلال التابع ψ نفسه وهكذا فان التابع $|\psi|^2$ هو التابع الموجي الذي يمكّننا من ربط الخواص الموجية للجسيم بالخواص الاحتمالية لمكان وجوده .

يوءكد المعنى الفيزيائي المذكور للتابع الموجي أن الحقل الموجي $\psi(x,y,z,t)$ ، اختصاراً $\psi(\vec{r}, t)$ ، يختلف عن بقية

الحقول في الفيزياء الكلاسيكية ، اذ لا معنى فيزيائياً هنا للمقدار Ψ الذي يمكن أن يكون تخيلياً وكذلك فان كلاً من Ψ و $\Psi' = A\Psi$ (حيث A ثابت ما حقيقي) يمكن أن يعطي المعنى الفيزيائي نفسه طالما أن كلاً منهما يمكن أن يوءدي الى التوزع الاحتمالي نفسه طبقاً للعلاقة (1.3) غير أنه يمكن تعيين الثابت A بحساب احتمال وجود الجسيم في كل نقاط الفراغ ، هذا الاحتمال الذي يجب أن يساوي الواحد طبعاً، أي :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,y,z,t)|^2 \, dV = 1 \qquad (1.4)$$

تعبر العلاقة عما يسمى شرط تنظيم التوابع الموجية (شرط التوحيد)، فاذا كان التابع $\Psi(\vec{r},t)$ في (1.3) منظماً على الواحد فيمكن تحويل التناسب الى مساواة وبالتالي نجد :

$$dW = |\Psi(x,y,z,t)|^2 dV = \rho(x,y,z,t)\, dV \qquad (1.3)'$$

حيث ρ هي الكثافة الاحتمالية (مقدار الاحتمال في واحدة الحجوم) أما احتمال وجود الجسيم في حجم محدود V فيعطى بالعلاقة :

$$W(V,t) = \int_V dW = \int_V |\Psi(x,y,z,t)|^2 dV \qquad (1.5)$$

لنلاحظ أخيراً أن التابع الموجي المنظم بالشرط (1.4) . لا يتغير اذا بدلناه بالتابع $\Psi' = e^{i\alpha}\Psi$ ، حيث $\alpha = \alpha(x,y,z,t)$ هو أي تابع حقيقي للاحداثيات والزمن، اذ نحصل على النتيجة نفسها لأن :

$$|e^{i\alpha}|^2 = e^{i\alpha} e^{-i\alpha} = 1$$

5 - التابع الموجي لمجموعة جسيمات :

كثيراً ما نتعامل في الفيزياء الكوانتية مع مجموعة جسيمات لذلك لابد من دراسة بعض الخواص العامة للتابع الموجي الذي يصف سلوك مجموعة جسيمات ويكون من الشكل :

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$$

ولنفرض أنه يصف مجموعة مؤلفة من N جسيم في اللحظة t ، ولنأخذ أولاً الحالة العامة عندما تتأثر الجسيمات بعضها ببعض فيمكن أن نكتب ، كتعميم للحالة السابقة أن المقدار :

$$dW \propto |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 dV_1 dV_2 \dots dV_N \quad (1.6)$$

يجب أن يمثل احتمال وجود الجسيم (1) في عنصر الحجم dV_1 والجسيم (2) في عنصر الحجم dV_2 ... الخ، أما اذا أردنا كتابة احتمال وجود الجسم رقم (1) في عنصر الحجم dV_1 وبتوزع اختياري لبقية الجسيمات فانه يجب استكمال العلاقة (1.6) في كل عناصر الحجوم ما عدا الحجم V_1 الخاص بالجسيم رقم (1) أي :

$$dW_1 = dV_1 \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 dV_2 dV_3 \dots dV_N \quad (1.7)$$

وكذلك بالنسبة لبقية الجسيمات . أما شروط التنظيم في هذه الحالة فهو :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 dV_1 dV_2 \dots dV_N = 1 \quad (1.8)$$

حيث يجري التكامل على ساحة ذات $3N$ بعداً وليس في الفراغ العادي (x, y, z) .

وفي الحالة الخاصة عندما يكون لدينا N جسيم غير متأثرة

بعضها ببعض فان احتمال وجود كل منها في حيزه الخاص يكون مستقلاً عن الآخر. وعندئذ نكتب العلاقة (1.6) بالشكل :

$$dW = dW_1 \, dW_2 \dots dW_N =$$

$$= |\Psi_1(\vec{r}_1,t)|^2 dV_1 \cdot |\Psi_2(\vec{r}_2,t)|^2 dV_2 \dots |\Psi_N(\vec{r}_N,t)|^2 dV_N \qquad (1.9)$$

والتابع الموجي لمجموعة جسيمات يمكن أن يكتب كجداء للتوابع ($\Psi_k(\vec{r}_k, t)$) حيث $k = 1, 2, \dots, N$ أي :

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t) = \Psi_1(\vec{r}_1,t)\Psi_2(\vec{r}_2,t)\dots\Psi_N(\vec{r}_N,t) \qquad (1.10)$$

6 ـ التابع الموجي لجسيم حر (غير خاضع لأي كمون) :

بعد أن أوردنا بعض الملاحظات العامة على التابع الموجي سنبحث عن شكل هذا التابع الذي يصف سلوك جسيم حر . ويبدو للوهلة الأولى صعوبة ذلك فلا بد من ادخال مفاهيم حديثة جديدة ، لأن الفيزياء الكلاسيكية ، كما يظهر ، لاتطبق هنا . ولكن ألا يمكن الاستفادة منها الى حد ما ؟ فهل يمكن مثلاً تطبيق المفهوم المضاعف الجسيمي الموجي لحساب التابع الذي يصف سلوك جسيم ؟ لنعترف أننا أدخلنا بعض المفاهيم الكلاسيكية فيما مضى فقولنا احتمال وجود الجسيم في عنصر الحجم dV يعني أن هناك مكاناً في الفراغ يمكن أن نجد فيه مثل هذا الجسيم (معنى جسيمي) وقولنا أن له خواص موجية تثبت أنه يمكن أن نستعمل بعض المفاهيم الكلاسيكية كطول الموجة الذي يمكن أن يقاس من دراسة توضع الحلقات الانعراجية على اللوحة الحساسة .

فلنفرض أولاً أنه يمكن اعطاء الالكترون كمية حركة P وطاقة

E بحيث يكون :

$$E = \frac{P^2}{2m} \qquad (1.11)$$

وهذا يتحقق تجريبيا بصعوبة بايجاد حزمة الكترونات تتسرع بواسطة كمون معطى بشكل دقيق ، وعندئذ يمكن أن يكون لكمية الحركة معنى.

أما الخطوة التالية فقد اقترحها العالم الفرنسي دوبروي حيث فرض أن الالكترون المتحرك بكمية حركة P يترافق بموجة طولها λ يعطي بالعلاقة :

$$|P| = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{2\pi\lambda\!\!\!^-} = \frac{\hbar}{\lambda\!\!\!^-} = \hbar\,|K| \qquad (1.12)$$

حيث $\vec{K}$ الشعاع الموجي ويساوي عددياً مقلوب طول الموجة $|K| = 1/\lambda\!\!\!^-$ أي ما يشبه بالضبط العلاقة (1.1) المطبقة على الفوتونات الضوئية .

لنفرض أيضاً أن طاقة الجسيم يمكن أن تعطى بعلاقة مشابهة كما في حالة الفوتونات أي $E = \hbar\omega$ حيث $\omega = 2\pi\nu$ وعندئذ يمكننا كتابة التابع الموجي لجسيم حر يتحرك بكمية حركة P كحل المعادلة الموجية، كما في حالة الضوء، بالشكل التالي :

$$\Psi_p(\vec{r},t) = A\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)} = A\, e^{i(\vec{K}\cdot\vec{r}-\omega t)} \qquad (1.13)$$

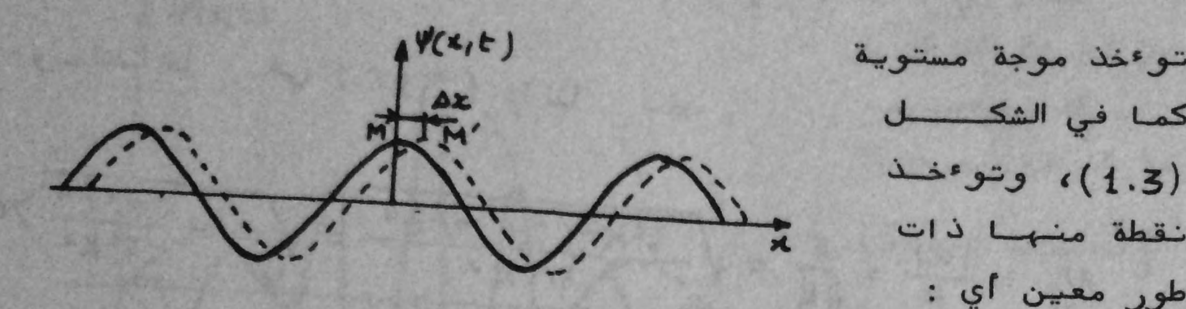
ان تواتر الاهتزازات في هذه الحالة يمكن أن يحسب أيضاً من العلاقات السابقة فنكتب كما في حالة الفوتونات أيضا :

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{P^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar K^2}{2m} \qquad (1.14)$$

7 – سرعة الطور ، سرعة الباقة الموجية :

ان سرعة انتشار طور معين للاهتزاز الذي يسمى سرعة الطـــور تحسب في نظرية الاهتزازات كما يلي :

نوءخذ موجة مستوية كما في الشكـــل (1.3)، ونوءخـذ نقطة منهـا ذات طور معين أي :



$$\varphi = P_x x - E t = Const.$$

شكل (1.3)
الموجة المستوية وحساب سرعة الطور

فعندما يزداد الزمن بمقدار Δt فان النقطة M الموضحة علـــى الشكل تنتقل بمقدار Δx فتصبح في M' بحيث يكون من أجل الموجة نفسها (نفس الطور) :

$$\varphi = P.(x+\Delta x) - E.(t+\Delta t) = Const.$$

وسرعة النقطة M (سرعة الطور) ستكون :

$$v_\varphi = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{E}{P} = \frac{\hbar\omega}{\hbar K} = \frac{\omega}{K} \qquad (1.15)$$

ويمكن حساب v_φ للالكترونات اذا بدلنا ω بقيمتها من العلاقـــة (1.14) :

$$v_\varphi = \frac{\hbar K^2}{2mK} = \frac{\hbar K}{2m}$$

هذا ويمكن حساب v_φ بشكل آخر ، اذا كتبنا العبارة النسبية للطاقة :

$$E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$$

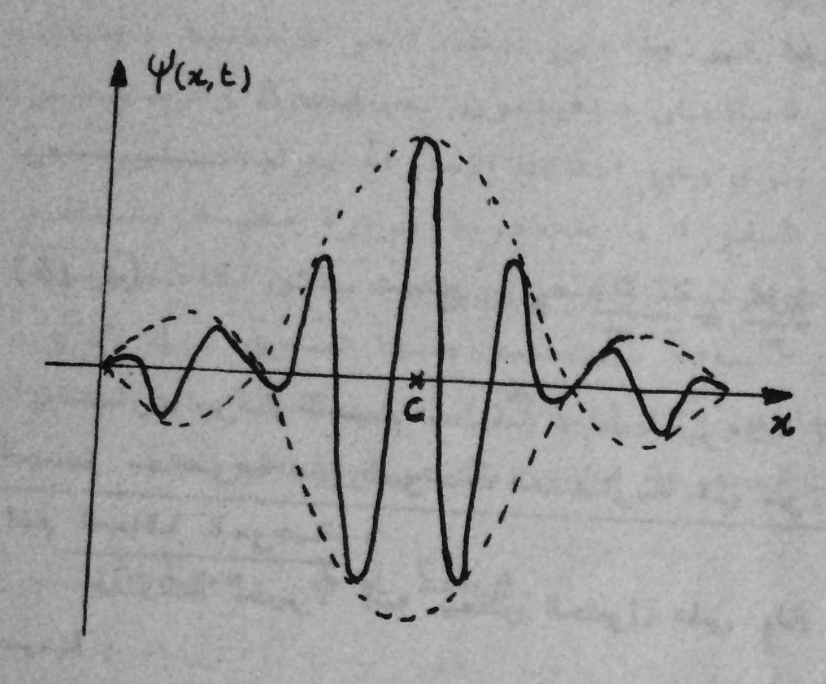
وبدلناها في (1.15) فإننا نجد :

$$v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{\hbar k} = \sqrt{\frac{\hbar^2k^2c^2 + m_0^2c^4}{\hbar^2k^2}} = \sqrt{c^2 + \frac{m_0^2c^4}{\hbar^2k^2}} > c$$

الا أنه طبقاً للنظرية النسبية لايمكن لجسيم أن يسير بأسرع من سرعة الضوء c ، وبالتالي فان الموجة المستوية الآنفة الذكر،لايمكن أن تحمل الالكترون؛فاذا انطبقا في لحظة ما ($t = 0$ مثلاً) فانهما سيفترقان حتماً فيما بعد لأن سرعة الطور (سرعة انتشار الموجة) أكبر من سرعة الجسيم، فهل هذا يعني أن المفهومين الجسيمي والموجي معاً لايمكن أن يكون لهما معنى الا في لحظة معينة ؟ وبعبارة أخرى ليس لفرضية دوبروي معنى الا في لحظة معينة من الزمن ؟ فالجسيم لايرافق بموجة الا في تلك اللحظة ؟

الحقيقة أنه يمكننا الخروج من هذا المأزق اذا فرضنا أن الالكترون لايرافق بموجة مستوية وحيدة اللون وانما بمجموعة من الموجات المستوية التي لها تواترات قريبة بعضها من بعض وسنجد تجسيداً لذلك في الفقرة القادمة حيث نستنتج مبدأ مهما من مبادىء فيزياء الكم . ولكن قبل أن ننهي هذه الفقرة لابد من التذكير بتعريف سرعة الباقة الموجية استناداً الى نظرية الاهتزازات فنقول انه عندما تنتشر مجموعة موجات متقاربة في عددها الموجي (في تواترها) في وسط ما فان الاهتزازة الناتجة لكل نقطة من الوسط ستكون عبارة عن مجموع الاهتزازات التي تأتيها من كل موجة وبالتالي فان الاهتزازة ستكون عظمى في النقطة التي تتطابق فيها

أطوار الموجات وستكون صغرى عندما تتعاكس هذه الأطوار. نسمى النقطة c حيث يكون المطال أعظمياً بمركز المجموعة الموجية شكل (1.4) .



شكل (1.4)
الباقة الموجبة

نرمز لسرعة المركز c بالرمز v_g ونسميه سرعة الباقة الموجية (Group velocity) (سرعة المجموعة) (Vitesse de groupe) وليس من الصعب حساب v_g اذا لاحظنا أن كل الموجات تتطابق في اطوارها في المركز c مهما كانت أطوال موجاتها (مهما كان عددها الموجي)

وبالتالي فان الطور الناتج المقابل لـ c لايتعلق بـ K ويعبر عن ذلك رياضياً بالعلاقة :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial k} = 0$$

$$p = \hbar K \quad E = \hbar \omega$$

حيث :

$$\varphi = Kx - \frac{E}{\hbar}t = kx - \frac{\hbar^2 k^2}{2m\hbar}t$$

نشتق فنجد :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial k} = x - \frac{\hbar}{m}kt$$

وهذه العلاقة صحيحة في اللحظة $t + \Delta t$ أيضاً حيث ينتقل المركز c بمقدار Δx فنجد عندئذ :

$$\Delta x - \frac{\hbar}{m} k \Delta t = 0$$

ومنـــه :

$$v_g = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v \qquad (1.18)$$

أي تساوي سرعة الجسيم تماماً ، مما يؤكد أنه يمكن أن يترافق الجسيم بمجموعة من الموجات المتقاربة في تواترها والتي يطلق عليها اسم الباقة الموجية .

لنلاحظ أخيراً أنه يمكن الحصول على v_g باشتقاق ω بالنسبة الى k :

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}\left(\frac{E}{\hbar}\right) = \frac{d}{dk}\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m\hbar}\right) = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v \qquad (1.18)'$$

8 – التحقيق التجريبي لفرضية دوبروي – مبـــدأ التراكب :

(Principle of superposition , Principe de superposition)

بينا في الفقرة السابقة، كيف فرض العالم دوبروي (De Broglie) وجود موجة ترافق الجسيم في حركته وسنبحث في هذه الفقرة التحقيق التجريبي لهذه الفرضية ثم نستنتج معداً هاماً آخر من مبـــادئ الميكانيك هو مبدأ التراكب .

بما أن للالكترون خواص موجية فيجب أن يحدث له ظواهـــر انعراجية على شبكة الانعراج أيضا بالاضافة الى ما لاحظناه فـــي

الفقرة الأولى من الظواهر الانعراجية على حواف ثقب .

ولرؤية ظواهر الانعراج على شبكة يجب أن تتحقق شروط خاصة تتعلق بالشبكة نفسها وبطول موجة الضوء الوارد ، فلا يمكن مثلاً دراسة انعراج الأشعة السينية على شبكة انعراج عادية مهما دقت خطوطها ولذلك فكر العالمان دافيدسون Davidson وجرمر Germer، بطريقة أخرى وهي احداث الانعراج بواسطة بلورة من النيكل اذ ان ذرات هذه البلورة ، تحت درجة حرارة معينة ،تنتظم لتكون خطوطا شبيهة بخطوط شبكة الانعراج بحيث يمكن للالكترونات أن تنعرج عليها اذ ان المسافة بين خطين منها تساوي $0.91 \mathring{A}$ وبالتالي فان عددها يساوي $10^{+8}/0.91 \simeq 10^{+8}$ في السم الواحد. فاذا طبقنا على الالكترونات المنعرجة قانون الانعراج المعروف :

$$N\lambda = 2d \sin\theta \qquad (1.19)$$

(حيث d عرض الحز وهو المسافة بين صفين من الذرات N، رقم هدب الانعراج، θ زاوية الانعراج)، لأمكننا أن نحسب طول الموجة λ المرافقة للالكترون المنعرج فنجد أن :

$$\lambda = 1.65 \mathring{A}$$

أما اذا حسبناها بالاستناد الى علاقة دوبروي لالكترون طاقته $E = 54\ eV$ وكمية حركة P فنجد أن :

$$\lambda = \frac{h}{P} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{6.63\times10^{-27}\times10^{+8}}{\sqrt{2\times9.1\times10^{-28}\times54\times1.6\times10^{-12}}} = 1.66 \mathring{A}$$

وهذا يوافق النتيجة التجريبية المقاسة ($\lambda = 1.65 \mathring{A}$) مما يدعم نظرية دوبروي ، كذلك أجريت عدة تجارب أخرى للتحقق من علاقة دوبروي فعينت الأطوال الموجية الموافقة لنويات الهيليوم

والهيدروجين H باستخدام ظاهرة الانعكاس على سطوح ^4He بلورية وقد كانت النتائج دائما تثبت البنية الموجبة للمادة .

ولايهمنا هنا الخاصة الانعراجية للشبكة فقط وانما، وبصورة أكثر الخاصة التحليلية لها ،فلو كان الضوء الوارد وحيد اللون لما تحلل ، أما اذا كان موءلفاً من عدة موجات متقاربة في أطوالها الموجبة فلا بد أن تتحلل عندما تمر ضمن شبكة ونحصل على مجموعة أضواء وحيدة اللون . والحادثة نفسها تحدث للالكترونات التي ، كما رأينا سابقاً ، لايمكن أن تحملها موجة مستوية (وحيدة اللون) ولذلك فان الحزمة الواردة للشبكة والموءلفة من انطباق عدد من الموجات المستوية ستحلل الى مجموعة حزم الكترونية تتصف بأن لكل منها طول موجة معيناً وبالتالي، حسب العلاقة $P = h/\lambda$، كمية كحركة معينة . ويجب أن لايفهم هذا التعيين بالمعنى الدقيق للكلمة اذ تبقى λ محصورة بين $\lambda - \Delta\lambda$ ، $\lambda + \Delta\lambda$ مهما كانت شدة تحليل الشبكة .

وهكذا يمكن اعتبار الشبكة كجهاز يحلل حزمة الالكترونات الواردة الى عدة حزم نجد في كل منها الالكترونات التي لها طول موجة معين ، أي أن الشبكة تحلل الحالات الكوانتية التي كانت مجموعة في الحزمة الواردة الى كل الحالات المكونة لها . ولهذا أهمية أساسية، اذ يمكن تشبيهه بنشر فوريه الذي يعطي أي تابع دوري مهما كان دوره يشكل مجموعة توابع بسيطة كما هو معروف في الرياضيات. فلنكتب الآن هذا النشر للتابع الموجي الذي يصف حالة الالكترونات الواردة الى شبكة الانعراج $\psi(x, y, z, t)$ بدلالة التوابع البسيطة التي تفرق اليها وهي ذات كمية حركة معينة أي موجات مستوية كما في (1.13)، أي $\psi_p(x, y, z, t)$:

$$\psi(x, y, z, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(P_x, P_y, P_z)\, \psi_p(x, y, z, t)\, dP_x\, dP_y\, dP_z \qquad (1.20)$$

حيث $C(P_x, P_y, P_z)$ يعطي الوزن الاحصائي للحالة $\psi_p(x,y,z,t)$
فاذا أخذنا الثابت A في (1.13) مساوياً $(1/2\pi\hbar)^{3/2}$
فيمكننا أن نكتب (1.20) بالشكل :

$$\psi(\vec{r},t) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(\vec{p}) \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)} \, d\vec{p} \qquad (1.21)$$

وهذه العلاقة هي التعبير الرياضي عن مبدأ التراكب في ميكانيك الكم وهو يعني أنه اذا وجدت جملة كوانتية في حالات موصوفة بالتوابع الموجية $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n$ فانها يمكن أن توجد في الحالة الموصوفة بالتابع :

$$\Psi = \sum_n C_n \psi_n \qquad (1.22)$$

وأهمية هذا المبدأ ، بصورة خاصة ، تكمن في أنه يحدد المعادلات التفاضلية الخطية لتعيين ψ. واذا أخذ الوسيط n في (1.22) قيماً غير متقطعة (متصلة) فيمكن تحويل الجمع الى تكامل كما في (1.21) .

لنأخذ تطبيقا على ذلك ، فندرس التابع الموجي لجسيم كمية حركته غير معينة بصورة تامة ولكنها تقع في المجال $P_0 - \Delta P < P < P_0 + \Delta P$ ولتبسيط المسألة نفرض أن الحركة تحدث في الاتجاه Ox ، أي أن $\vec{p}\cdot\vec{r}$ تصبح :

$$\vec{p}\cdot\vec{r} = P_x x + P_y y + P_z z = P_x x = P x$$

وعندئذ نكتب (1.21) بالشكل :

$$\psi(\vec{r},t) = \psi(x,t) = \int_{P_0-\Delta P}^{P_0+\Delta P} C(P) \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} e^{\frac{i}{\hbar}(Px - Et)} \, dP \qquad (1.23)$$

أو بدلالة k، اذا أخذنا بدلاً من المتحول P المتحول $k = P/\hbar$، فنحصل على المعادلة :

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi}} \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} C'(k)\, e^{i(kx-\omega t)}\, dk \qquad (1.24)$$

ويسهل اجراء هذا التكامل اذا علمنا أن $\Delta k << k$ أي $k \simeq k_0$ وأن $C'(k) \cong C'(k_0)$ وكذلك نكتب $k = k_0 + (k - k_0)$.
وبما أن ω تابع لـ k فيمكن نشره حول القيمة $\omega = \omega_0$ الموافقة لِ $k = k_0$ فنجد:

$$\omega = \omega_0 + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}(k-k_0) = \omega_0 + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 (k-k_0) \qquad (1.25)$$

وذلك باهمال الحدود الصغيرة من المرتبة الثانية فما فـــــــــــوق.
وبالتبديل في (1 . 24) نجد :

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi}}\, C'(k_0) \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} dk\, e^{i\left\{[k_0 + (k-k_0)]x - [\omega_0 + \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 (k-k_0)t]\right\}}$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi}}\, C'(k_0)\, e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} e^{i\left[(k-k_0)x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 (k-k_0)\right]} dk$$

لنغير الآن المتحول فنفرض $k - k_0 = u$، وهذا مكافىء لنقل المحور الاحداثي الشاقولي الى اليمين بمقدار k_0، وعندئذ يصبح التكامـــــل :

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\pi}}\, C'(k_0)\, e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\Delta k}^{+\Delta k} e^{iu\left[x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t\right]} du \qquad (1.26)$$

$$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{2\hbar}{\pi}}\,C'(k_0)\,\frac{\sin\left[\Delta k\left(x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t\right)\right]}{x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t}\,e^{i(k_0x-\omega_0 t)} \qquad (1.27)$$

تمثل المعادلة السابقة (1 . 27) حزمة موجية لأنهـا تتـألف من انطباق عدة موجات متقاربة في كمية حركتهـا (أو أعدادها الموجية) وسعة هذه المجموعة، ككل، متغيرة وتعطى بالعلاقة :

$$B=\sqrt{\frac{2\hbar}{\pi}}\,C'(k_0)\,\frac{\sin\left[\Delta k\left(x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t\right)\right]}{x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0 t} \qquad (1.28)$$

أما سرعة الباقة الموجية فتعطى حسب التعريف (1.18) في النقطة $k=k_0$ بالعلاقة :

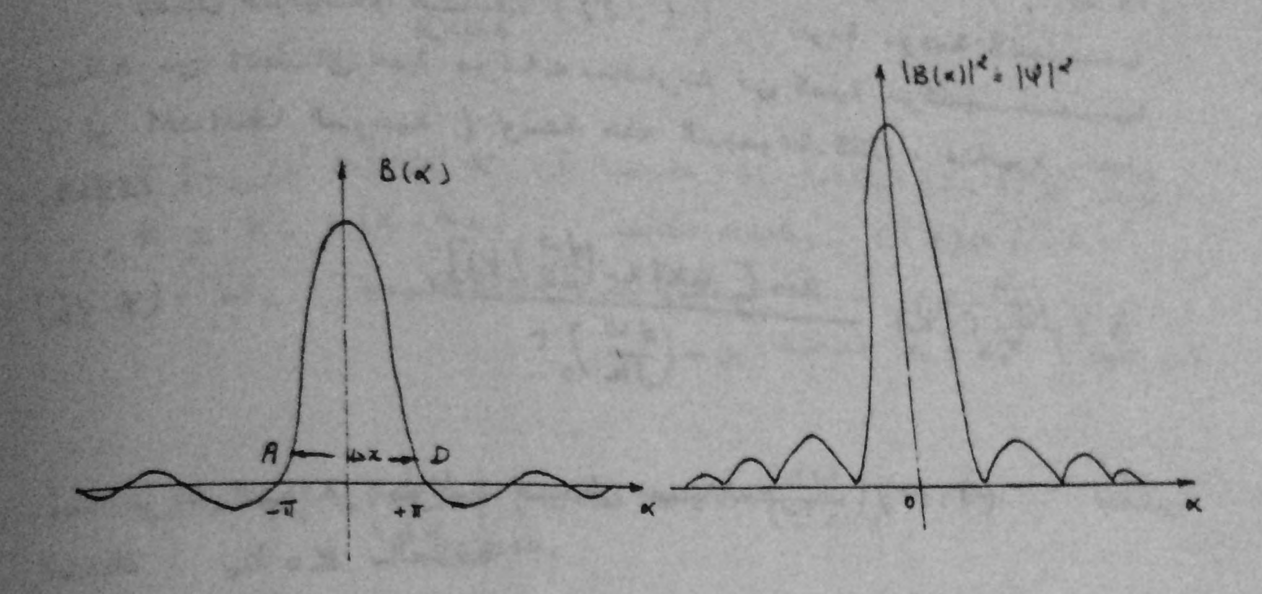
$$v_g=\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0=\frac{d}{dk}\left(\frac{\hbar k^2}{2m}\right)_0=\left(\frac{\hbar k}{m}\right)_0=\frac{p_0}{m}$$

لنلاحظ أخيراً أنه حسب احتمال وجود الجسيم الموصوف بالتابع $\psi(x,t)$ فانه يكون للمقدار $|\psi(x,t)|^2$ نهاية عظمى في النقطة x وفي لحظة t بحيث ينعدم المخرج ، لنرسم التابع الدال على تغيرات السعة (1 . 28) بدلالة الزاوية $\alpha=\Delta k(x-v_g t)$ في اللحظة t فنلاحظ أن B تأخذ نهاية عظمى حادة مقدارهـا:

$$B_{max}=\sqrt{\frac{2\hbar}{\pi}}\,C'(k_0)\,\Delta k$$

في النقطة التي تحقق العلاقة $\Delta k(x-v_g t)=0$ أي عندمـا $x=v_g t$ ثم يهبط الخط البياني عندما تتغير الزاويـة α وينعدم في النقط التي تحقق العلاقة :

$$\alpha_m = \Delta k(x - v_g t) = \pm m\pi \qquad (1.29)$$



شكل (1.5)
تغيرات سعة الباقة الموجية $B(\alpha)$ بدلالة الزاوية α في اللحظة $t=0$.

شكل (1.6)
تغيرات احتمال وجود الجسيم المرافق للباقة الموجية في اللحظة $t=0$ بدلالة x (أو α).

ويوضح الشكل (1.5) تغيرات سعة الباقة الموجية $B(\alpha)$ بدلالة الزاوية α في اللحظة $t=0$، أما احتمال وجود الجسيم في تلك اللحظة في واحدة الحجوم أي $|\psi|^2$ فيتمثل بيانياً حسب الشكل (1.6)، حيث نلاحظ الاحتمال الأعظمي لوجود الجسيم في مركز الباقة الموجية وهذا ما دعا بعض العلماء سابقاً للقول أن الجسيم متمركز في النقطة 0 ولكن ثبت فيما بعد أن هذا الجسيم يمكن أن يوجد في أي مكان من الباقة الموجية المرافقة له .

نلخص ما سبق بما يلي :

ان العلاقة (1.27) هي التعبير الرياضي عن مبدأ التراكب في ميكانيك الكم وهي تعني أن مجموعة موجات متقاربة في عددها الموجي K (حيث K تقع في المجال $K_0 - \Delta K < k < k_0 + \Delta K$) هو موجة جديدة عددها الموجي k_0 وتواترها ω_0 لكن مطالها متغير ويعطى بالعلاقة (1.28) .

9 – مبدأ الشك

(*Uncertainty principle , Principe d'incertitude*)

الصلة مابين م . كم و م . كلاسيكي :

سنبرهن في نهاية هذا الفصل أن لمفهوم الباقة الموجية المعطاة بالمعادلة (1.27) أهمية أساسية اذ سنحدد بواسطتها مجال تطبيق الميكانيك الكلاسيكي على الجسيمات الصغيرة ، وسنقتصر هنا على مفهومي كمية الحركة وموضع الجسيم (احداثياته) على أن نعود لبرهان العلاقات الرياضية فيما بعد .

من المعلوم أن للموجة المستوية امتداداً لانهائياً في الفراغ فلنحسب عرض الباقة الموجية المعطاة بالمعادلة (1.27) في الزمن t ، ولنفرض أن العرض المذكور هو المسافة بين النقطتين A و D على الشكل(1.5) الموافقتين لـ $\alpha_1 = -\pi$ و $\alpha_2 = +\pi$ فنجد أخيراً من (1.29) بعد تبديل α_m ب $-\pi$ و $+\pi$ على الترتيب ثم الطرح أن :

$$x_2 - x_1 = \Delta x = \frac{2\pi}{\Delta K}$$

ومنه :

$$\Delta x . \Delta K = 2\pi \qquad (1.30)$$

ولكن هذه العلاقة تقريبية وليست دقيقة تماماً لأننا اكتفينا

كما أننــــا (1.25) عند نشر المقدار ω بحد واحد في (1.25) كما أننــــا
اعتبرنا $C'(K) \simeq C'(K_0)$ وبالتالي يمكننا أن نؤكـــد
أن الحالة العامة تتطلب دراسة أشمل وعندئذ سنحصل على علاقـــات
أخرى أكثر دقة من (1.30) نوردها فيما يلي علـــى أن
نبرهنها عند دراسة الأسس الرياضية لميكانيك الكم وهي :

$$\Delta x \cdot \Delta P_x \gtrsim \hbar \qquad (1.31)$$

(وتقرأ الاشارة $\gtrsim$ من رتبة) .

أما اذا كان انتشار الموجة بالاتجاه oy أو oz فسنحصل على العلاقتين :

$$\Delta y \cdot \Delta P_y \gtrsim \hbar \qquad (1.32)$$

$$\Delta z \cdot \Delta P_z \gtrsim \hbar \qquad (1.33)$$

تعبر هذه العلاقات الثلاث عما يسمى عدم التعيين (أومبدأ الشك) في ميكانيك الكم وسندرس المعنى الفيزيائي لها .

ان عرض الباقة الموجية المرافقة للالكترون تساوي Δx وهذا يعني أنه اذا أجرينا قياساً على الالكترون فسنجده في مكان مـــا من هذا العرض أي أن موضعه معين بخطأ Δx ولكن ليس لهذا الالكترون كمية حركة معينة تماماً لأنه ، كما ذكرنا سابقاً، لتشكيل الباقـــة الموجية الموافقة له أخذنا مجموعة من الأمواج المستوية ، تتقارب في عددها الموجي K (أو في كمية حركتها) أي أن P معين في المجال $P_0 - \Delta P < P < P_0 + \Delta P$ وهذا يعني أنه اذا أجرينا قياساً لتعيين اندفاع (كمية حركة) هذا الالكترون (المعيـــن مكانه في المجال Δx) فسيتعين معنا بتقريب ΔP، أي أن القيمتين x ، P لايمكن أن تتعينا معا بدقة في وقت واحد وانمـــا الدقة في تعيين أحدهما ($\Delta x \longrightarrow 0$) سيقابلها تعيين أقـــل دقة (خطأ كبير) في الآخر لأن ΔP_x يكبر كثيراً .

ويجب أن نؤكد أن عدم التعيين هذا من الخـــواص الأساسيـــة

للجسيمات المجهرية ولا علاقة له مطلقا بجهاز القياس ، مهما كانت دقة التجربة (تجربة الانعراج الشهيرة خلال الثقبين مثلا) فسنحصل دائماً على النتائج نفسها ، فالمسار هنا اذن ليس له معنى، ونلاحظ دائماً على الصفيحة الحساسة الخطوط العريضة (بالنسبة لحجم الالكترون) الدالة على اصطدام الالكترونات بهذه الصفيحة ، مما يدل على أن موضع الالكترون لايعين الا بالدقة المحددة بحجم المسار على الصفيحة الحساسة ، وهذا يعني أنه لايمكن ، قياساً بالميكانيك الكلاسيكي، دراسة الحركة ، أي تعيين المسار (موضع الجسيم) والسرعة في الوقت نفسه بالدقة التامة وكل ما يمكننا عمله هو التأكد أن هذا الجسيم واقع في مكان محدد بخطأ Δx وله كمية حركة محددة بخطأ أعظمي ΔP_x ، مع العلم أن الدقة في تعيين احدى الكميتين ستكون على حساب الكمية الأخرى لأنهما مرتبطتان بالعلاقة (1.31).

لنناقش الحالة الخاصة ، حالة موجة مستوية منتشرة باتجاه $0x$ فمن المعلوم أن لها شعاعاً موجياً ثابتاً ومعيناً بدقة تعريفاً، أي أن $\Delta P_x \to 0$ فينتج من (1.31) أن $\Delta x \to \infty$ أي أن امتدادها لانهائي ، وفي الحقيقة اذا حسبنا المقدار $|\Psi|^2$ الذي يعطي الكثافة الاحتمالية في الفراغ وجدناه يساوي مقداراً ثابتاً $(1/2\pi\hbar)$ وبالتالي فان احتمال وجود الجسيم المرافق للموجة المستوية في كل الفراغ لايتعلق بالمكان فيمكن أن يوجد هذا الجسيم في أي نقطة وبالتالي $\Delta x \to \infty$ وعلى العكس (عكس الموجة المستوية اذا صح التعبير) اذا كان الموضع معيناً تماماً كما في غرفة ويلسون $\Delta x \to 0$ فان كمية حركة الالكترون ستكون معينة بـ $\Delta P \to \infty$ فهل هذا يعني هذا تناقضاً ما ؟ وهل يطابق الواقع ؟ أي هل تكون كمية الحركة لانهائية وبالتالي فالطاقة لانهائية أيضا ؟ الحقيقة أن لاوجود لهذا التناقض لأن مكان الالكترون في غرفة ويلسون غير محدد بدقة فهو معين بحجم قطيرة السائل المتكونة الذي هو من مرتبة $10^{-4}\ Cm$ وبالتالي فان :

$$\Delta P_x \simeq \frac{\hbar}{\Delta x} \simeq 10^{-23}\ gr.Cm/sec.$$

وبما أن كتلة الالكترون من مرتبة 10^{-27} gr فان مقدار الخطأ في حساب سرعته في هذه الحالة يساوي :

$$\Delta v_x = \frac{1}{m} \Delta P_x = 10^4 \ cm/sec.$$

وهذا المقدار كبير ولكن يمكننا قبوله اذا علمنا أن لالكترونات في غرفة ويلسون سرعة تتجاوز 10^9 cm/sec أي $\Delta v_x << v$.
اذا وضعنا علاقة الشك (1.31) بالشكل :

$$\Delta x \, \Delta v_x \gtrsim \frac{\hbar}{m} \qquad (1.34)$$

فاننا نستنتج أن الفيزياء الكلاسيكية تطبق بدقة تتناسب طرداً مع m .
لنأخذ مثلاً جسيماً قطره 1 ميكرون وكتلته 10^{-10} gr فنجد :

$$\Delta x \, \Delta v_x \simeq 10^{-17}$$

فاذا كان موضع هذا الجسيم معيناً بخطأ 10^{-6} cm فان مقدار الخطأ في تعيين سرعته هو :

$$\Delta v_x \simeq 10^{-11} \ cm/sec.$$

فاذا علمنا أن سرعة جسيم يتحرك بحركة براونية في مائع تقارب 10^{-4} cm/sec، فانه يمكن قبول الخطأ السابق (10^{-11}) وهو يصغر مع كبر كتلة الجسيم .
ان هذه الملاحظات تقودنا الى ما يسمى مبدأ التقابل الذي يمكننا بواسطته الانتقال الى م . كلاسيكي إلى م . كم بتبديل $\hbar$ أو ($\hbar/m$) بالصفر ، وهذا يعني اهمال كل التأثيرات التي تتناسب مع $\hbar$ فنحصل على القوانين الكلاسيكية المعروفة . فاذا أخذنا الجسيمات التي يتحقق بالنسبة لها أن المقدار $\hbar/m$ صغير جداً فانه

يمكننا مباشرة اهماله ، وهذا ممكن عندما تكون كتلة الجسيم كبيرة (بالقياس الى الجسيمات المجهرية طبعا) فمثلاً عندما $m = 1 gr$ نجد :

$$\frac{\hbar}{m} \simeq \frac{10^{-27}}{1} = 10^{-27} \text{ erg. sec./gr.}$$

وهو مقدار صغير جداً يمكن اهماله .

لنلاحظ أخيراً أن علاقات الشك تسمح لنا باجراء بعض الحسابات التقريبية ، فاذا فرضنا أن الجسيم يتحرك في مجال l أي أن $x = l$ فان كمية حركته ستكون محصورة بالمجال :

$$P_x = \Delta P_x \gtrsim \frac{\hbar}{l}$$

وبالتالي فان طاقته ستعطى بالعلاقة :

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ml^2} \qquad (1.35)$$

فاذا طبقنا هذه العلاقة على نوكلونات (بروتونات أو نترونات) النواة التي قطرها يتراوح ما بين 10^{-13} cm و 10^{-12} cm مع العلم أن كتلة النوكلون تساوي $m_N = 1.66 \times 10^{-24}$ gr. فاننا نجد :

$$E = \frac{\hbar^2}{2ml^2} = \frac{10^{-54}}{2 \times 1.66 \times 10^{-24} \times 10^{-25}} \text{ erg} \gtrsim 1 \text{ MeV}$$

وهذه الطاقة تقارب في قيمتها الطاقة المقاسة تجريبياً مما يؤكد المعنى الفيزيائي لعلاقات الشك .

مسائل الفصل الأول

1 - أوجد ، باستخدام علاقات الشك، أصغر قطر لذرة الهيدروجين اذا علمت أن طاقة الالكترون الحركية فيها تبلغ $10\ eV$.

2 - تتألف حزمة موجية من الموجتين المستويتين :

$$u_1(x,t) = \cos(1002\,t - 3x)$$

$$u_2(x,t) = \cos(1005\,t - 3.01x)$$

أحسب سرعة الطور لكل موجة ثم سرعة المجموعة لهذه الحزمة الموجية .

3 - من المعلوم أن سرعة الطور تعطى بالعلاقة $v = w/k$ ، أحسب هذه السرعة في الحالتين النسبية والكلاسيكية .

4 - يتحرك الكترون في شبكة بلورية قطرها $1\mu.m$ بطاقة حركية $T = 15\ eV$ أوجد الدقة في حساب سرعته .

5 - استخدم العلاقة $\Delta x\, \Delta P_x \gtrsim \hbar$ لحساب طاقة السوية الأساسية في ذرة الهيدروجين اذا علمت أن ابعاد الذره هي $1\mathring{A}$.

6 - أوجد أصغر قيمة لطاقة الهزاز التوافقي ، انطلاقا من علاقات الشك .

7 - أعد السوءال نفسه لحساب طاقة الكترون واقع على أقرب مدار من النواة .

8 - يوصف جسيم بالتابع التالي :

$$\psi(x) = A\, e^{-\frac{x^2}{a^2} + ikx}$$

آ - أحسب الثابت A ثم احسب $\langle x \rangle$ ، $\langle P \rangle$.

ب - اذا فرضنا أن :

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 , \quad \langle (\Delta P)^2 \rangle = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2$$

فاحسب المقدار $\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle$ لهذا الجسيم الموصوف بالتابع $\psi(x)$ السابق .

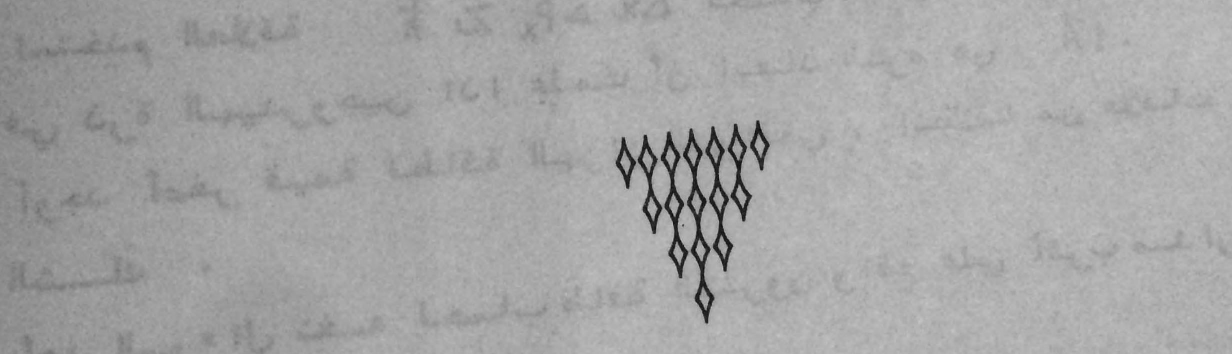
9 – أحسب تحويل فورييه (تكامل فوريه) للتابع $f(x) = e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$.

10 – برهن أن التابع $f(x-x') = \frac{1}{2\pi}\int e^{ik(x-x')}\,dk$ يؤول الى تابع ديراك $\delta(x-x')$.

11 – برهن أن الموجة التالية :

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} & \text{if } |x| < l/2 \\ 0 & \text{if } |x| > l/2 \end{cases}$$

ليست مستوية عندما تأخذ l قيما صغيرة . عين المجال $\Delta k = k - k_0$ حيث يمكن اعتبار سعات الموجات المكونة لها لاتساوي الصفر ، ثم استنتج علاقة الشك $\Delta x\,\Delta p_x \simeq \hbar$.



فاحسب المقدار $\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle$ لهذا الجسيم الموصوف بالتابع $\psi(x)$ السابق .

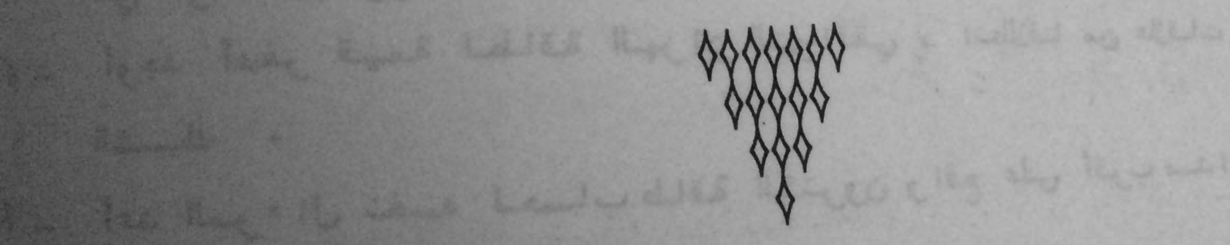
٩ - أحسب تحويل فوريه (تكامل فوريه) للتابع $f(x) = e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$.

١٠ - برهن أن التابع $f(x-x') = \frac{1}{2\pi}\int e^{ik(x-x')}\,dk$ يؤول الى تابع ديراك $\delta(x-x')$.

١١ - برهن أن الموجة التالية :

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} & \text{if } |x| < l/2 \\ 0 & \text{if } |x| > l/2 \end{cases}$$

ليست مستوية عندما تأخذ l قيما صغيرة . عين المجال $\Delta k = k - k_0$ حيث يمكن اعتبار سعات الموجات المكونة لها لاتساوي الصفر ، ثم استنتج علاقة الشك $\Delta x \, \Delta p_x \simeq \hbar$.



الفصل الثاني

معادلة شرودنغر الموجيّه - تطبيقات

10- استنتاج معادلة شرودنغر :

(Schrödinger equation , Equation de Schrödinger)

رأينا في الفصل السابق أن التابع الموجي الذي يصف سلوك جسيم يتحرك حراً بكمية حركة P يعطى بالعلاقة :

$$\psi(\vec{r},t) = A\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{P}\cdot\vec{r} - Et)} \qquad (2.1)$$

وسنبحث في هذه الفقرة عن المعادلة التفاضلية التي حلها هو التابع ψ، ثم نعمم ذلك فنستنتج معادلة شرودنغر لجسيم يتحرك في حقل كمون V . ولذلك نشتق (2.1) أولاً بالنسبة للزمن ثم بالنسبة للاحداثيات فنجد :

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E A\, e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{P}\vec{r} - Et)} = -\frac{i}{\hbar} E \psi \qquad (2.2)$$

فاذا علمنا أن :

$$\vec{p}\cdot\vec{r} = p_x x + p_y y + p_z z$$

فيمكن أن نحسب :

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\ ,\quad \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\ ,\quad \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}$$

حيث نجد :

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar}\, p_x A\, e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z - Et)} = \frac{i}{\hbar}\, p_x \psi$$

وكذلك :

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{i}{\hbar}\, p_x \psi\ \frac{i}{\hbar}\, p_x \psi = -\frac{1}{\hbar^2}\, p_x^2\, \psi$$

وبالطريقة نفسها يتم حساب المقدارين الباقيين.وهكذا نجد :

$$\nabla^2\psi = \Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \qquad (2.3)$$

فاذا قارنا بين (2.2) ، (2.3) نجد بسهولة :

$$i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2\psi \qquad (2.4)$$

وهي معادلة شرودنغر لجسيم حر (غير خاضع لأي كمون).ونلاحظ أنها معادلة تفاضلية خطية من المرتبة الأولى بالنسبة للزمن ومن المرتبة الثانية بالنسبة للاحداثيات ، وهي عقدية أيضاً أي أن حلها يجب أن يعطى بتابع عقدي . كذلك يمكن ملاحظة أن أي تركيب للتابع $\psi(\vec{r},t)$ المعطى بالعلاقة (2.1) يمكن أن يكون حلاً لها كما هو معروف في أبحاث المعادلات التفاضلية الخطية، ذلك الفرع الوحيد الموافق لميكانيك الكم ، تحقيقاً لمبدأ التراكب الذي أشرنا اليه في الفصل الأول .

اذا فرضنا أن الجسيم يتحرك بالاتجاه ox فمن الممكن أن يكون التابع :

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \qquad (2.5)$$

أحد حلول المعادلة (2.4) فاذا حسبنا $\partial\Psi/\partial t$ ، $\nabla^2\Psi$ من (2.5) ثم بدلناها في (2.4) نجد بسهولة بعد الاختصار على $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ أن :

$$\nabla^2\Psi(x)+\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x)=0 \quad (2.6)$$

وهي معادلة شرودنـغر المستقرة (المستقلة عن الزمـــــن) (Stationary , stationnaire) لجسيم حر .

لنبحث الآن عن معادلة شرودنـغر المستقرة لجسيم يتحرك باتجاه ox في كمون $V(x)$ ولذلك نلاحظ أن الطاقة E المعطـــــاة بالعلاقة السابقة هي الطاقة الحركية أي كما رأينا :

$$E=T=\frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)$$

ومن الطبيعي أنه لايمكن اعتبارها ، عند تعميم المعادلة (2.6) ، الطاقة الكلية ؛ اذ لوصح ذلك لنتج بالتالي أن التابع الموجـــي المقابل لايتعلق بالكمون $V(x)$ وهذا مخالف للواقع ، فـــاذا علمنا أن الطاقة الكلية تساوي الطاقة الحركية مضافاً اليها الكامنة (أي أن $T=E-V(x)$) وبدلنا في (2.6) نجد معادلـــة شرودنـغر المطلوبة في هذه الحالة :

$$\nabla^2\Psi(x)+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V(x)\right]\Psi(x)=0 \quad (2.7)$$

وحلها يعطي التابع $\Psi(x)$ الذي يصف الجسيم في هذه الحالة . ولحساب التابع $\Psi(x,t)$ نضرب $\Psi(x)$ بـ $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ طبقاً لـ (2.5) .

أما الكثافة الاحتمالية لوجود الجسيم في نقطة x في اللحظة t فتساوي :

$$|\Psi(x,t)|^2=|\Psi(x)|^2 \quad (2.8)$$

وهي غير تابعة للزمن ، وهذه نتيجة طبيعية ، اذ أن احتمال وجود الجسيم الخاضع للكمون $V(x)$ ، غير المتعلق بالزمن ، في أي نقطـــة

من الفراغ يجب أن يكون مستقلا عن الزمن (مثل الالكترونات في الذرة والنوكلونات في النواة) .

لنبحث أخيراً عن الشكل العام لمعادلة شرودنغر عندما يتحرك الجسم في الفراغ وهو خاضع لكمون ما $V(\vec{r})$، ويسهل علينا ايجادها بملاحظة العلاقة (٢.٤) ؛ اذ أنه عندما نشتق التابع $\Psi(\vec{r},t)$ بالنسبة للزمن نجد $-\frac{i}{\hbar}E\Psi$ وهذا يكافىء ضرب هذا التابع من اليسار بالمقدار $-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ وبالتالي يمكن أن نبدل في المعادلة (٢.٧) $E\Psi$ بالمقدار $-i\hbar\,\partial/\partial t$ فنجد أخيراً الحالة العامة لمعادلة شرودنغر التي تصف جسيماً كتلته m يتحرك في حقل كمون $V(\vec{r})$ وهي :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r},t)\right]\Psi(\vec{r},t) \qquad (٢.٩)$$

ان معادلة شرودنغر تقابل بالضبط معادلة نيوتن في م. كلاسيكي كما أن حل معادلة نيوتن يؤدي الى ايجاد موضع الجسيم في كل لحظة، وكذلك فان حل معادلة شرودنغر يعطي التابع Ψ الذي يعطينا مربعه $|\Psi|^2$ احتمال وجود الجسيم في كل لحظة في كل نقطة من الفراغ ، حتى عندما يتعلق هذا الاحتمال بالزمن .

ويجب الاشارة في نهاية هذه الفقرة الى أن الدراسة السابقة ليست كافية رياضياً لاستنتاج معادلة شرودنغر ولكن المهم هو أن هذه المعادلة كغيرها من المعادلات الأساسية في الفيزياء ، كمعادلة نيوتن في التحريك ومعادلات ماكسويل في الحقل الكهرطيسي ، كانت تعميما " ذكيا " للكثير من التجارب في بداية القرن العشرين ، كما كانت الخطوة الهائلة في تقدم علم الفيزياء . وسنجد فيما بعد كيف أن كثيراً من الظواهر في الفيزياء النووية والذرية تثبت صحتها ، ولنذكر أخيراً أنه لكتابة الحل النهائي لمعادلة شرودنغر ، كأي معادلة تفاضلية أخرى، لابد من تعيين الثابت ولهذا يجب معرفة ما يسمى بالشروط البدائية (المتعلقة بالزمن) أي معرفة $\Psi(\vec{r},0)$ (قيمة التابع الموجي في اللحظة $t=0$) ومعرفة التابع Ψ ومشتقاته

في نقطة ما (الشروط الحدّية) لنتمكن من تعيين الثابتين المتعلقين بالاحداثيات ، باعتبار أن المعادلة من المرتبة الثانية بالنسبة للاحداثيات ، وسنرى أن تلك الشروط (الحديه) الموضوعة على التابع الموجي ستساعدنا في حساب طاقة الجسيم الموصوف بالتابع Ψ ، كما سنرى في الفقرات القادمة .

11 - كثافة التيار الاحتمالي :(Probability current density)

ان حل المعادلة (2.9) سيعطى بتابع من الشكل $\Psi(\vec{r},t)$ ، وهو يصف سلوك الجسيم كما أنه يتغير بتغير المكان $\vec{r}$ والزمن t ، الا أن هذا التغير لايحدث كيفياً وسنبرهن أنه يخضع لعلاقة شبيهة بمعادلة الاستمرار المعروفة في الفيزياء الاحصائية التي تعبر عن انخفاظ عدد الجسيمات ، لقد رأينا أن المقدار :

$$|\Psi(\vec{r},t)|^2 = \Psi^*(\vec{r},t)\,\Psi(\vec{r},t) = |\Psi|^2$$

يمثل الكثافة الاحتمالية وأن المقدار $|\Psi|^2 dV$ يمثل احتمال وجود الجسيم في عنصر الحجم dV فالكمية $\rho = |\Psi|^2$ تلعب دور تابع التوزع الاحصائي في الفيزياء الاحصائية ودور كثافة المادة في جسيم ما ، ومن المعلوم أن ρ يحقق في الفيزياء الاحصائية ما يسمى معادلة الاستمرار (نظرية ليوفيل) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{J} = 0$$

وسنبرهن أن $|\Psi|^2$ يحقق علاقة مشابهة هنا نحصل عليها فيما يلي :

لنكتب أولاً معادلة شرودنغر بالشكل :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi$$

ومرافقها العقدي :

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* + V\Psi^*$$

لنضرب الأولى بـ Ψ^* والثانية بـ Ψ من اليسار ثم نطرح فنجد أخيراً :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^*\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^* \right) \quad (2.10)$$

وبتقسيم الطرفين على $i\hbar$ وملاحظة أن $\nabla^2 = \nabla\nabla$ وأن :

$$\nabla\left(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^* \right) = \nabla\Psi^* \nabla\Psi + \Psi^* \nabla^2\Psi - \nabla\Psi \nabla\Psi^* - \Psi\nabla^2\Psi^*$$
$$= \Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*$$

فاننا نحصل أخيراً على العلاقة :

$$\frac{\partial(\Psi^*\Psi)}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2m} \nabla\left(\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi \right) = 0 \quad (2.11)$$

لنعرف كثافة التيار الاحتمالي J بالعلاقة :

$$J = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi \right) \quad (2.12)$$

ثم لنستكمل طرفي (2.11) على الحجم V حيث توجد الجسيمات الموصوفة بالتابع Ψ فنجد :

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \rho \, dV + \int_V \operatorname{div} J \, dV = 0 \quad (2.13)$$

ويمكن تحويل التكامل الثاني الى تكامل على سطح بتطبيق نظرية غوص-اوستراغرادسكي :

$$\int_V \operatorname{div} J \, dV = \oint_S J_n \, dS \quad (2.14)$$

حيث S السطح الذي يحد الحجم V ، فاذا بدلنا (2.14) في (2.13) فان التكامل يمثل عندئذ تغير عدد الجسيمات ضمن السطح S في واحدة الزمن ، أما التكامل الثاني فيمثل عدد الجسيمات الخارجة من السطح S في واحدة الزمن .

وبما أن المعادلة (2.13) صحيحة من أجل أي حجم V فانه يمكن أن نكتب أخيراً معادلة الاستمرار في ميكانيك الكم كما يلي :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} J = 0 \quad (2.15)$$

وهي تقابل قانون انخفاظ الجسيمات في الفيزياء الكلاسيكية ، ولنذكر أخيراً أن J ، المعرف في (2.12) ، يساوي الصفر عندما يكون Ψ حقيقياً .

١٤ـ دراسة جسيم في حفرة كمون لانهائية العمق :

لندرس كتطبيق أول على معادلة شرودنغر ، حركة جسيم في حفرة مربعة معينة بالعلاقة :

$$V(x)=\begin{cases}0 \text{ if } 0<x<l\\ \infty \text{ if } x\leq 0,\ x\geq l\end{cases} \qquad (2.16)$$

وهي موضحة بيانياً على الشكل المرافق (2.1) .

شكل (2.1)
حفرة الكمون ذات الأبعاد اللانهائية

بما أن الطاقة الحركية T تساوي $E-V(x)$ وأن $V(x)$ لانهائي خارج المجال $0<x<l$ و E محدودة و T لايمكن أن تكون سالبة ، اذن لايمكن أن يوجد الجسيم خارج الحفرة الموضحة على الشكل (2.1) فهو اذن يتحرك في المجال $0<x<l$ ، فكأنه واقع في حفرة حقيقية لايستطيع أن يخرج منها الا عندما يتسلق جدرانها اللامتناهية في الارتفاع حسب (2.16) . ان هذا المثال البسيط سيساعدنا على فهم كثير من المجموعات الكوانتية ومما يجعل له اهمية أكثر هو أنه يطبق بتقريب مقبول لدراسة الالكترونات في الذرة والنوكلونات في النواة .

لقد ذكرنا أن معادلة شرودنغر في ميكانيك الكم تشبه معادلة نيوتن في الميكانيك الكلاسيكي التي يساعدنا حلها على

تعيين موضع النقطة المادية في كل لحظة وبالتالي حساب طاقة هذه النقطة المادية ، وهو ما نهتم به أكثر في م. الكم . وهنا يتطلب من معادلة شرودنغر حساب التابع الموجي Ψ الذي سيساعدنا على تعيين موضع الجسيم في كل لحظة ، أما طاقته فسنحسبها من الشروط الحدية التي يجب أن يخضع لها التابع Ψ .

لنلاحظ أولاً انعدام Ψ في المجالين $x<0 , x>l$ لأن الجسيم لايمكن أن يوجد هناك أي أن :

$$\Psi(x>l) = \Psi(x<0) = 0 \qquad (2.17)$$

كما أن Ψ يجب أن تنعدم أيضا عندما $x=l , x=0$ بسبب الشروط العامة لاستمرارية التابع الموجي أي :

$$\Psi(x=0) = \Psi(x=l) = 0 \qquad (2.18)$$

لنكتب الآن معادلة شرودنغر المستقرة داخل الحفرة فنجد بسهولة :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi$$

أو :

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + K^2\Psi = 0 \quad , \quad \left(K = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right) \qquad (2.19)$$

وهو العدد الموجي نفسه حسب التعريف . ان حل المعادلة السابقة سهل وهو :

$$\Psi = A \sin(Kx + \alpha) \qquad (2.20)$$

حيث A ، α ثابتا التكامل يعينان من الشروط الحدية .

لنعين أولاً الثابت α فنستخدم الشرط $\Psi(0)=0$ فنجد بفرض $A \neq 0$:

$$\Psi(0) = A \sin\alpha = 0 \Rightarrow \alpha = 0$$

أما الشرط $\Psi(l)=0$ فيعطي :

$$\Psi(l) = A \sin kl = 0$$

ومنـــه :

$$Kl = n\pi \qquad (2.21)$$

حيث n عدد صحيح. ففي الحالة الخاصة عندما $n=0$ نجد $k=0$ وبالتالي فان طاقة الجسيم (التي تساوي طاقته الحركيـــة هنا، $V=0$) تساوي الصفر و $\Psi=0$ أيضاً، وينعدم وجود الجسيم فـــي كل نقط الفراغ ، وليس لهذا أي معنى فيزيائي ، فهذا الحـــل مرفوض ولذلك نأخذ $n \geqslant 1$ أما طاقة الجسيم E فيمكن أن تحسب من (2.19) و (2.21) حيث نجد :

$$E_n = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{l^2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\, n^2 \qquad (2.22)$$

وهذا سيعني أنه سيكون للجسيم في حفرة الكمون المربعة طاقـــة متقطعة وليست مستمرة كما في الميكانيك الكلاسيكي ويقال أن الطاقة مكممة .

ان أصغر طاقة يمكن أن يأخذها الجسيم تنتج من أجل $n=1$:

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2} \qquad (2.23)$$

وتسمى E_1 الطاقة الأساسية (السـوية الأساسية للطاقة) أما السويات الباقية التي نحصل عليها عندما $n = 2, 3, 4, \ldots$ فتسمى السويـات المهيّجة ، أما جملة هذه السويات فتكوّن ما يسمى طيف الطاقـــة (أو سويات الطاقة Energy levels) الموضح على الشكل(22).

لنلاحظ أن طاقة السوية الأساسية لاتتعارض مع علاقات الشك ومن السهل البرهان على ذلك اذا اعتبرنا أن الجسيم موجود في المجـال $0 < x < l$ (أي أن $\Delta x \simeq l$) ثم حسبنا كمية حركته حسب علاقة الشك فنجد :

$$P = \Delta P \simeq \frac{\hbar}{\Delta x} \simeq \frac{\hbar}{l}$$

أما الطاقة E فتساوي :

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ml^2}$$

وهو ما يشبه العلاقة (2.23) .

ان البعد ما بين سويتي الطاقة E_n ، E_{n+1} هو :

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}\left[(n+1)^2 - n^2\right] = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}(2n+1) \quad (2.24)$$

فمن أجل n معينة (سوية الطاقة ذات الرقم n) نجد أن هذه المسافة تكبر عندما تصغر كتلة الجسيم m ويصغر المجال الذي يمكن أن يكون فيه ؛

فمثلاً عندما $l = 5\times10^{-8}\ cm$

(أبعاد الذره)

$m = 10^{-27}\ gr$

(كتلة الالكترون)

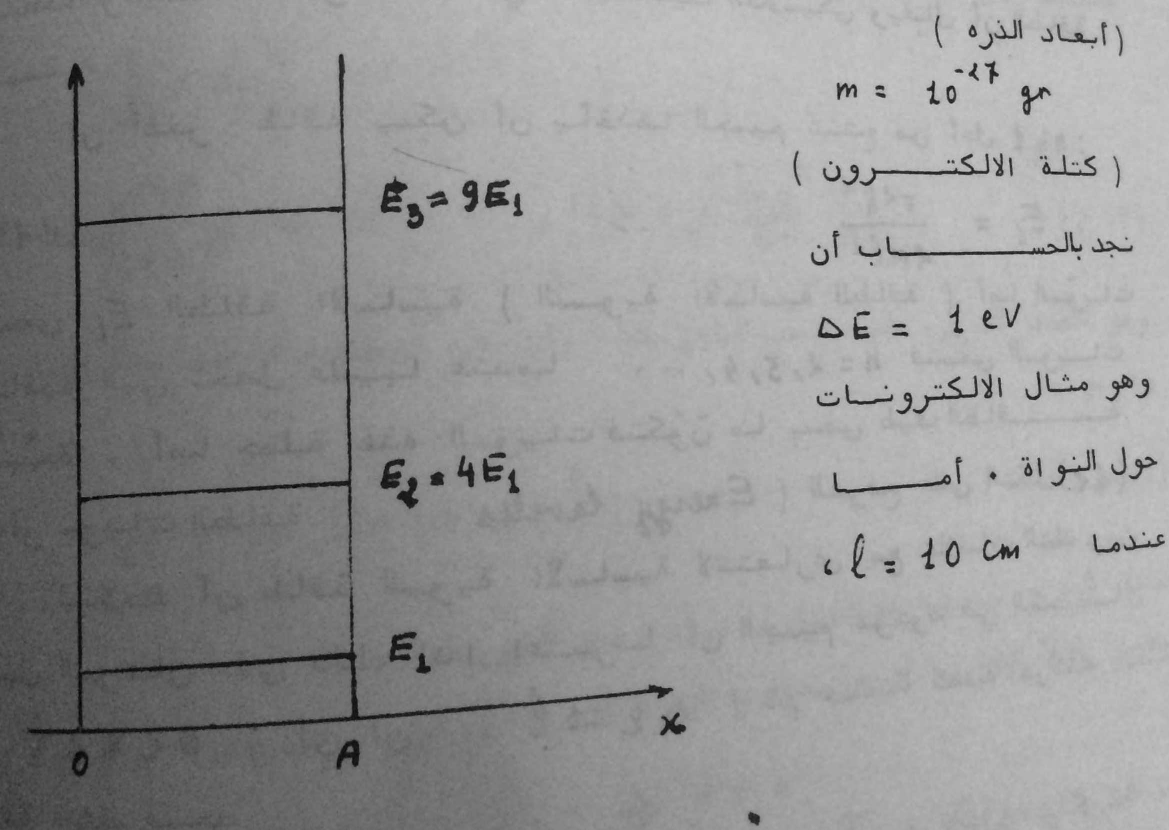
نجد بالحساب أن

$\Delta E = 1\ eV$

وهو مثال الالكترونات

حول النواة . أما

عندما $l = 10\ cm$ ،



شكل (2.2)
سويات الطاقة

$m = 10^{-23} gr$ فنجد $\Delta E = 10^{-20} eV$ (حالة الجسيمات الكبيرة) فاذا قورنت هذه الطاقة مع طاقة الجسيم الحرارية KT (K ثابت بولتزمان ، T درجة الحرارة المطلقة) التي تساوي $0.025 eV$ نجد أنها صغيرة جدا بالنسبة الى KT ، أي أن $(\Delta E/E) \to 0$ وبالتالي يمكن اعتبار طاقة الجسيمات الكبيرة مستمرة وتأخذ جميع القيم وليست متقطعة كما في حالة الجسيمات المجهرية .

لنحسب أخيراً البعد النسبي بين سويات الطاقة $\Delta E_n/E_n$ فنجد عندما يكون n كبيرا :

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} \simeq \frac{1}{n} \qquad (2.25)$$

وهي تنتهي الى الصفر عندما $n \to \infty$ وهذا يعني أنه لايوجد طيف طاقة متقطع للسويات العليا المهيجة وهذا يتوافق مع التجربة حيث أن للذرات والنويات طيف طاقة متصلاً عند تلك السويات وكلما زاد بعد السوية المهيجة عن السوية الأساسية ازداد التصاق السويات بعضها ببعض .

لنعين الآن الثابت A من الشروط العامة لتنظيم التابع المذكورة في الفصل الأول . ان التابع الموجي الموافق لسوية الطاقة ذات الرقم n هو :

$$\Psi_n = A_n \sin Kx = A_n \sin \frac{\pi n}{l} x \qquad (2.26)$$

حيث تحسب A_n من شرط التنظيم التالي :

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^* \Psi_n \, dx = \int_0^l |A_n|^2 \sin^2 \frac{\pi n}{l} x \, dx = 1$$

ومنه :

$$I = |A_n|^2 \frac{l}{2} = 1 \Rightarrow A_n = \sqrt{\frac{2}{l}} \qquad (2.27)$$

أي أن A تساوي قيمة ثابتة لكل السويات (لاتتعلق بـ n) وبالتالي يمكن كتابة Ψ_n في الحالة العامة :

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{\pi n}{l} x$$

(2.28)

لتعين موضع الجسيم ولهذا نرسم التوابع الموجية Ψ_n ومربعاتها $|\Psi_n|^2$ ويسهل تحقيق هذا برسم التابع Ψ_n في المجال $0 < x < l$ ثم تربيع كل نقطة منه فنحصل على الشكل (2.3) حيث يمثل الخط المنقط $\Psi_n(x)$ والخط المتصل $|\Psi_n(x)|^2$.

وهكذا نجد أن احتمالات وجود الجسيم في حفرة الكمون، مختلفة وتتغير بشكل جيبي، أي أن هناك نقطاً ضمن الحفرة يكون احتمال وجود الجسيم فيها معدوما وأخرى يكون أعظمياً.

أما في الميكانيك الكلاسيكي فان هذا الاحتمال سيكون متناسبا مع الزمن الذي يمكن أن يوجد خلاله الجسيم في المجال: أي $dx = l$

$|\Psi_n(x)|^2$ ——
$\Psi_n(x)$ ......
E_3
E_2
E_1
0
A
x

شكل (1.3)
الخط البياني الدال على تغيرات $\Psi_n(x)$ و $|\Psi_n(x)|^2$ من أجل $n = 1, 2, 3$.

($\Psi_n(x)$ ...... خط متقطع)
($|\Psi_n(x)|^2$ —— خط متصل)

(2.29)

$$dW_{cl.} \sim dt = \frac{1}{v} dx$$

وبما أن الجسيم لايخضع داخل الحفر لأي كمون ($V = 0$) فالقوة المؤثرة عليه معدومة وبالتالي سيتحرك بحركة منتظمة حسب قانون نيوتن

الأول أي $dW_{cl.} = const.$ ؛ فاحتمال وجود الجسيم في أي نقطة من الحفرة غير متعلق بـ x وهو يساوي مقداراً ثابتاً ،ويؤول متوسط الاحتمال الكوانتي الموضح في الشكل (2.3) الى $W_{cl.}$ عندما $n \to \infty$.

نلخص الآن النتائج التي حصلنا عليها من دراسة الجسيم في حفرة كمون :

1 - ان لطاقة الجسيم المجهري المتحرك في حفرة كمون قيماً متقطّعة.

2 - حتى في الحالة الأساسية (عندما $n = 1$ ، $E = E_1$) لايكون الجسيم ثابتاً وانما له طاقة حركية معينة E_1 .

3 - ان خاصة تقطّع الطاقة تظهر بوضوح عند الجسيمات ذات الكتلة الصغيرة التي تتحرك في حيز ضيق .

4 - عندما تأخذ E قيماً كبيرة فاننا نحصل على علاقات كلاسيكية كما هو الحال بالنسبة للمقدار $\Delta E_n / E_n$ الذي ينتهي الى الصفر عندما $n \to \infty$ وهذه حالة خاصة من مبدأ التقابل عندما ننتقل من م. كلاسيكي الى م. كم .

13 - دراسة جسيم في حفرة لانهائية ذات ثلاثة أبعاد :

ليست هذه الحالة سوى تعميم مباشر للحالة السابقة فلنفرض أن الحفرة محددة بالعلاقات :

$$0 < x < l_1 \;,\quad 0 < y < l_2 \;,\quad 0 < z < l_3$$

المحددة لمجال حركة الجسيم ، وعندئذ يمكن كتابة معادلة شرودنغر بالشكل :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}\right) = E\,\Psi \qquad (2.30)$$

أما الشروط الحدية الموافقة لهذه الحالة فهي :

$$\Psi(0,y,z) = \Psi(x,0,z) = \Psi(x,y,0) = 0$$

$$\Psi(l_1,y,z) = \Psi(x,l_2,z) = \Psi(x,y,l_3) = 0 \quad (2.31)$$

بالاستناد الى نظرية فصل

ويسهل حل المعادلة (2.30) المعادلات التفاضلية الجزئية فنجد أخيراً ثلاث معادلات

المتحولات في المعادلات تتعلق كل منها بأحد المتحولات وتوافق ثلاث

من الشكل (2.19) طاقات E_1, E_2, E_3 مجموعها يساوي الطاقة الكلية E في (2.30).

وهذه المعادلات من الشكل :

$$\frac{\partial^2 \psi_i(x_i)}{\partial x_i^2} + k_i^2 \psi_i(x_i) = 0 \quad (2.30)'$$

حيث $i = 1,2,3$ وكذلك $x_1 = x$ ، $x_2 = y$ ، $x_3 = z$

ويكون التابع الموجي الكلي هو جداء التوابع ψ_i بحيث يكـــون:

$$\Psi(x,y,z) = \psi_1(x)\,\psi_2(y)\,\psi_3(z) = B \sin k_1 x \sin k_2 y \sin k_3 z \quad (2.32)$$

حيث :

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_1^2 + k_2^2 + k_3^2\right) = E$$

ومن الشروط الحدية (2.31) نجد :

$$k_1 l_1 = n_1 \pi \,,\quad k_2 l_2 = n_2 \pi \,,\quad k_3 l_3 = n_3 \pi \quad (2.33)$$

وعندئذ تكون طاقة الجسيم (تعميم العلاقة (2.22)) :

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{l_1^2} + \frac{n_2^2}{l_2^2} + \frac{n_3^2}{l_3^2} \right) \qquad (2.34)$$

أما التابع الموجي فسيكون أيضا تعميماً للعلاقة (2.28) ،حيث نجد أخيراً (بعد تعيين الثابت B) :

$$\Psi_{n_1,n_2,n_3} = \sqrt{\frac{8}{l_1 l_2 l_3}} \, \sin \frac{\pi n_1}{l_1} x \, \sin \frac{\pi n_2}{l_2} y \, \sin \frac{\pi n_3}{l_3} z \qquad (2.35)$$

في الحالة الخاصة عندما تكون الحفرة بشكل مكعب حرفه l أي عندما $l_1 = l_2 = l_3 = l$ نجد قيمة الطاقة :

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m l^2} \left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 \right) \qquad (2.36)$$

وهي تتعلق بمجموع مربعات الأعداد الصحيحة n_1, n_2, n_3 فكيما تحولت هذه الأعداد (وبالتالي تغيرت التوابع الموجية الموافقة لها) بحيث يبقى مجموع مربعاتها ثابتاً فان الطاقة لاتتغير وعندئذ يقال أن سويات الطاقة منطبقة (أو متوالدة) (Degenerate) ودرجة انطباقها هو عدد الحالات الممكنة لتغير التوابع الموجية المقابلة للطاقة نفسها .

لنأخذ مثالاً على ذلك فنفرض أن : $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 6$

وعندئذ تكون الطاقة :

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2 m l^2} \, 6$$

وبما أن n_1, n_2, n_3 أعداداً صحيحة موجبة فسنحصل على الحالات الثلاث التالية :

$$\left.\begin{aligned} &1)\ n_1 = 2, \quad n_2 = 1, \quad n_3 = 1 \\ &2)\ n_1 = 1, \quad n_2 = 2, \quad n_3 = 1 \\ &3)\ n_1 = 1, \quad n_2 = 1, \quad n_3 = 2 \end{aligned}\right\} \qquad (2.37)$$

ولكل مجموعة منها تابع موجي مختلف هي :

$\Psi_{211} \quad , \quad \Psi_{121} \quad , \quad \Psi_{112}$

غير أن الطاقة هي نفسها للجميع فسويات الطاقة منطبقة ودرجة انطباقها تساوي ثلاثاً في هذه الحالة .

14 - الهزاز التوافقي: (The harmonic oscillator , L'oscillateur harmonique)

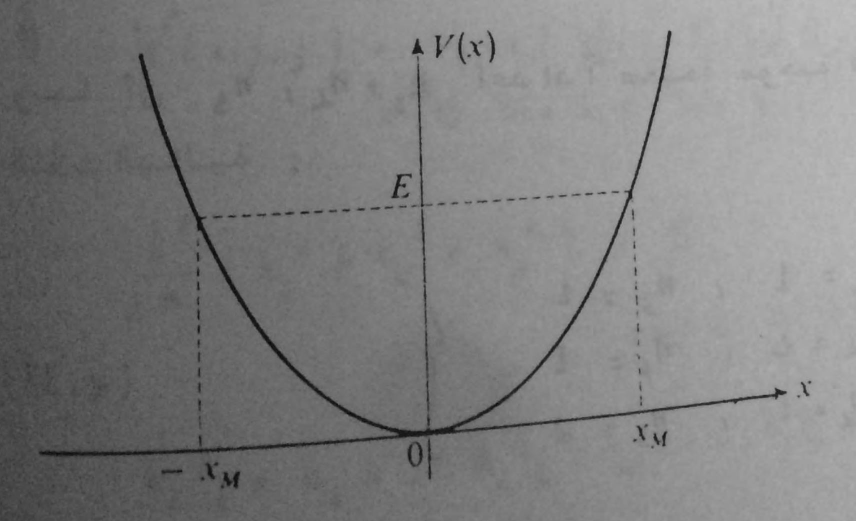
آ - حل معادلة شرودنغر ، حساب الطاقة :

سندرس الآن تطبيقاً آخر لمعادلة شرودنغر وهو دراسة حركة مستقيمة اهتزازية بين نقطتين حول وضع التوازن وهي حالة اهتزاز الذرات في الجزئيات ثنائية الذرة ، أما اهتزاز البلورة فيمكن أن يحلل الى مجموعة من الاهتزازات التوافقية ، ولذلك كان للحركة التوافقية في م.كم أهمية الحركات الجيبية (أو الحركات الدورية بصورة عامة) في الفيزياء الكلاسيكية .

من المعلوم أن الطاقة الكامنة هي $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ الموضحة بيانا على الشكل (2.4) ، أما القوة المؤثرة على الجسيم فهي :

$$\vec{F} = -\frac{\partial V}{\partial x}\vec{i} = -m\omega^2 x\vec{i} = -\alpha x\vec{i} \qquad (2.38)$$

حيث $\vec{i}$ متجهةالواحدة على المحور ox ، وهذا يعني أن $\vec{F}$ تتجه دائماً نحو مركز الاحداثيات مما يجعل النقطة المادية تتحرك دوماً بحركة خطية



شكل (2.4)
كمون الهزاز التوافقي

حول النقطة O (وضع التوازن) بين النقطتين A, B كما في الشكل (2.5) .

ولحل هذه المسألة في م . الكم نعوض الكمون $\frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ في معادلة شرودنغر الموافقة فنجد :

A ——— O ——— ← M ——— B ($\vec{F}$)

شكل (2.5)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2} m \omega^2 x^2\right)\psi = E\psi \qquad (2.39)$$

ثم نأخذ متحولا جديداً η وثابتاً جديداً λ حسب العلاقتين :

$$\eta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x \quad , \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \qquad (2.40)$$

فنجد بالتبديل في (2.39) المعادلة :

$$\frac{d^2\psi}{d\eta^2} - \eta^2\psi = \lambda\psi \qquad (2.41)$$

وهي معادلة تفاضلية خطية من المرتبة الثانية يمكن أن تحل بسهولة على طريقة السلاسل . ومن الواضح أن طاقة الجسيم E متعلقة بالثابت λ الذي يحسب بتطبيق الشروط الحدية على التابع الموجي المحقق للمعادلة (2.41) .

لنبحث اولاً عن الحل التقاربي لها عندما η (وبالتالي x) تنتهي الى اللانهاية وعندئذ يمكن اهمال الطرف الثاني بسبب صغره بالنسبة للطرف الأول فنحصل على المعادلة :

$$\psi_\infty'' - \eta^2\psi_\infty = 0 \qquad (2.42)$$

نبحث عن حل لها من الشكل $\psi = e^{\varepsilon\eta^2}$. نشتق مرتين فنجد :

$$\psi_\infty'' = (4\varepsilon^2\eta^2 + 2\varepsilon)\, e^{\varepsilon\eta^2} \simeq 4\varepsilon^2\eta^2 e^{\varepsilon\eta^2}$$

وبالتعويض في (2.42) ثم الاختصار على $e^{\varepsilon \eta^2}$ نجد :

$$4\varepsilon^2\eta^2 - \eta^2 = 0$$

ومنه $\varepsilon = \pm 1/2$. وعندئذ يكون الحل التقاربي :

$$\psi_\infty = c_1 e^{-\frac{1}{2}\eta^2} + c_2 e^{+\frac{1}{2}\eta^2}$$

وبما أن التابع الموجي يجب أن يكون محدوداً باعتبار أن الجسيم يقع في حيز معين فان الحد الثاني يجب أن ينعدم وبالتالي $c_2 = 0$ ، أما c_1 فيمكن اعتبارها تساوي الواحد لأن التابع الموجي غير منظم حتى الآن وهكذا نجد الحل التقاربي :

$$\psi_\infty = e^{-\frac{1}{2}\eta^2} \qquad (2.43)$$

لنبحث الآن عن الحل العام للمعادلة (2.31) ولهذا نفتش عن حل من الشكل :

$$\psi(\eta) = \psi_\infty\, u(\eta) = e^{-\frac{1}{2}\eta^2}\, u(\eta) \qquad (2.43)'$$

نشتق مرتين ونبدل :

$$\psi''(\eta) = \left[e^{-\eta^2/2}\, u(\eta)\right]'' = u'' - 2\eta u' + (\eta^2 - 1)u\, e^{-\eta^2/2}$$

$$u'' - 2\eta u' + (\lambda - 1)u = 0 \qquad (2.44)$$

وهي معادلة خطية من المرتبة الثانية نحلها بطريقة السلاسل :

$$u = \sum_{k=0}^{\infty} b_k \eta^k \quad , \quad u' = \sum_{k=0}^{\infty} b_k k \eta^{k-1} \qquad (2.45)$$

$$u'' = \sum_{k=0}^{\infty} b_k k(k-1)\eta^{k-2}$$

وبالتبديل في (2.44) نحصل على المعادلة :

$$\sum_{k=0}^{\infty} b_k \left[k(k-1)\eta^{k-2} - (2k + 1 - \lambda)\eta^k\right] = 0 \qquad (2.46)$$

فاذا بدلنا الآن في السلسلة الأولى كل k بـ $k+2$ لكي نجعل المعادلة متجانسة بالنسبة η^k فاننا نحصل على المطابقة :

$$\sum_{k=0}^{\infty} \eta^k \left[(k+2)(k+1)\, b_{k+2} - (2k+1-\lambda)\, b_k\right] \equiv 0 \qquad (2.47)$$

ولكي تتحقق هذه المطابقة من أجل كل الحدود (أي مهما كانت قيم k) يجب ، كما هو معلوم ، أن تساوي الصفر أمثال η^k حيث $k = 0, 1, 2, \ldots \infty$ ومنه نجد :

$$b_{k+2} = \frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)}\, b_k \qquad (2.48)$$

وهي تربط بين الأمثال b_k و b_{k+2} ، فاذا بدأنا من الصفر (زوجي) فستكون كل السلسلة زوجية ، أما اذا بدأنا من الواحد (فردي) فستكون كل السلسلة فردية .

ان شروط محدودية التابع الموجي تلزم تقارب السلسلة ولذلك لابد أن تنقطع عندقيمة ما k بحيث يكون $k = n$ (مرتبة أعلى حد في السلسلة) :

$$b_k \neq 0 \quad , \quad b_{k+2} = 0 \qquad (2.49)$$

فعندئذ نجد من (2.48) أن $2n + 1 - \lambda = 0$ ومنه نجد شرط انقطاع السلسلة وبالتالي محدودية التابع الموجي :

$$\lambda = 2n + 1 \qquad (2.50)$$

ومن هذه المعادلة يجب أن نحسب طاقة الجسيم التي نحصل عليها دائماً من الشروط الحدية ، كما رأينا في الفقرة السابقة ، فاذا رجعنا الى (2.40) وبدلنا λ بقيمتها نحصل على الطاقة :

$$2E / \hbar\omega = 2n + 1$$

ومنه :

$$\boxed{E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega} \qquad (2.51)$$

العدد الصحيح n ل يمكن اد

وهنا يختلف الأمر عن حفرة الكمون اد يمكن ل n العدد الصحيح أن يساوي الصفر وعندئذ نحصل على طاقة السوية الأساسية $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ وهي لاتساوي الصفر .

وهكذا نستنتج أن للهزاز التوافقي طاقة متقطعة وتختلف

بعضها عن بعض بمقدار $\hbar\omega$ ويمكن تمثيلها كما في حفرة الكمون، كسويات طاقة أخفضها السوية E_0 المقابلة لـ $n = 0$ والمعينة بالعلاقة (2.51) ، هذا ويمكن التحقق تجريبياً من وجود E_0 بدراسة تناثر الضوء على البلورات التي درجة حرارتها قريبة من الصفر المطلق ($T \simeq 0$) .

ب – التوابع الموجبة وتعيين مكان الجسم :

لنبحث الآن عن التوابع الموجبة الموافقة لقيم الطاقة الآنفة الذكر (التوابع الخاصة) (2.51) حتى نستطيع تعيين موضع الجسيم في كل لحظة ولذلك نلاحظ من (2.43) ومن ($2.43'$) أن الحل العام سيكون :

$$\psi_n = A_n \, e^{-\frac{1}{2}\eta^2} u(\eta) \qquad (2.52)$$

حيث A_n ثابت يعين من شروط التنظيم و $u(\eta)$ حل المعادلة (2.39) وهو كما رأينا كثيرة حدود تتعين من (2.45) حسب الشروط (2.49) تسمى كثيرة حدود هرميت ، ويبرهن في الرياضيات أنها من الشكل :

$$u(\eta) = H_n(\eta) = (-1)^n e^{\eta^2} \frac{d^n e^{-\eta^2}}{d\eta^n} \qquad (2.53)$$

ويسهل برهان أن (2.53) تحقق المعادلة (2.44) أي :

$$\frac{d^2 H_n}{d\eta^2} - 2\eta \frac{dH_n}{d\eta} + 2n H_n = 0$$

ومن المفيد كتابة التوابع الأولى من السلسلة H_n انطلاقاً من (2.53) حيث نجد بسهولة :

$$\left.\begin{aligned} &H_0(\eta) = 1 \ , \quad H_1(\eta) = 2\eta \\ &H_2(\eta) = 4\eta^2 - 2 \ , \quad H_3(\eta) = 8\eta^2 - 12\eta \\ &H_4(\eta) = 16\eta^4 - 28\eta^2 + 12 \end{aligned}\right\} \qquad (2.54)$$

لنحسب أخيراً الثابت A_n فنجد :

$$A_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\left(\frac{1}{n!\,2^n}\right)^{1/2} \qquad (2.55)$$

وللحصول على الشكل العام للتابع الموجي نبدل A بقيمتها في (2.52) فنجد بعد ملاحظة (2.53) أن :

$$\psi_n = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\left(\frac{1}{n!\,2^n}\right)^{1/2}(-1)^n\, e^{\frac{1}{2}\xi^2}\,\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \qquad (2.52)'$$

ويمكن البرهان أن التوابع ψ_n تحقق شرطي التوحيد والتعامد التاليين (التوامد) :

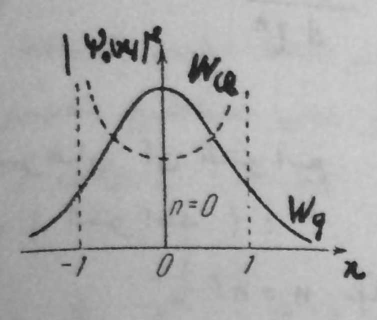
$$\int \psi_n \psi_{n'}\, dV = \delta_{nn'} = \begin{cases} 1 & \text{if } n = n' \\ 0 & \text{if } n \neq n' \end{cases} \qquad (2.56)$$

لنرسم الآن التوابع الموجية الموافقة لـ $n = 0, 1, 2, 3$ وذلك بحساب الصيغة الصريحة لكل منها اعتباراً من $'(2.52)$ فنحصل على الشكل (2.6)

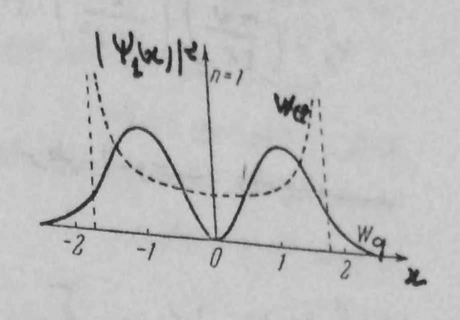
حيث يمثل هذا الشكل التوابع الموجية الموافقة لقيم n السابقة ويلاحظ أن التابع المقابل لـ $n = 0$ لاينعدم (ينعدم صفر مرة) أما التابع ψ_1 فينعدم مرة واحدة و ψ_2 مرتين ... وهكذا ولهذه الانعدامات معنى فيزيائي اذ يكون احتمال وجود الجسيم معدوماً في تلك النقط وتسمى عقد التابع الموجي .

شكل (2.6)

لندرس بالتفصيل احتمال وجود الجسيم المتحرك بحركة توافقية في الحالتين $n = 0, 1$ فنلاحظ أن $|\psi_0|^2 \neq 0$ لاينعدم ويمكن رسمه كما في الشكل (2.7) أما عندما $n = 1$ فيسهل رسم الاحتمال كما في الشكل (2.8) ففي الحالة الأولى يكون الاحتمال أعظمياً في النقطة $x = 0$ وفي الحالة الثانية ينعدم الاحتمال في تلك النقطة غير أنه يصبح أعظمياً في النقطتين ($-1, +1$)

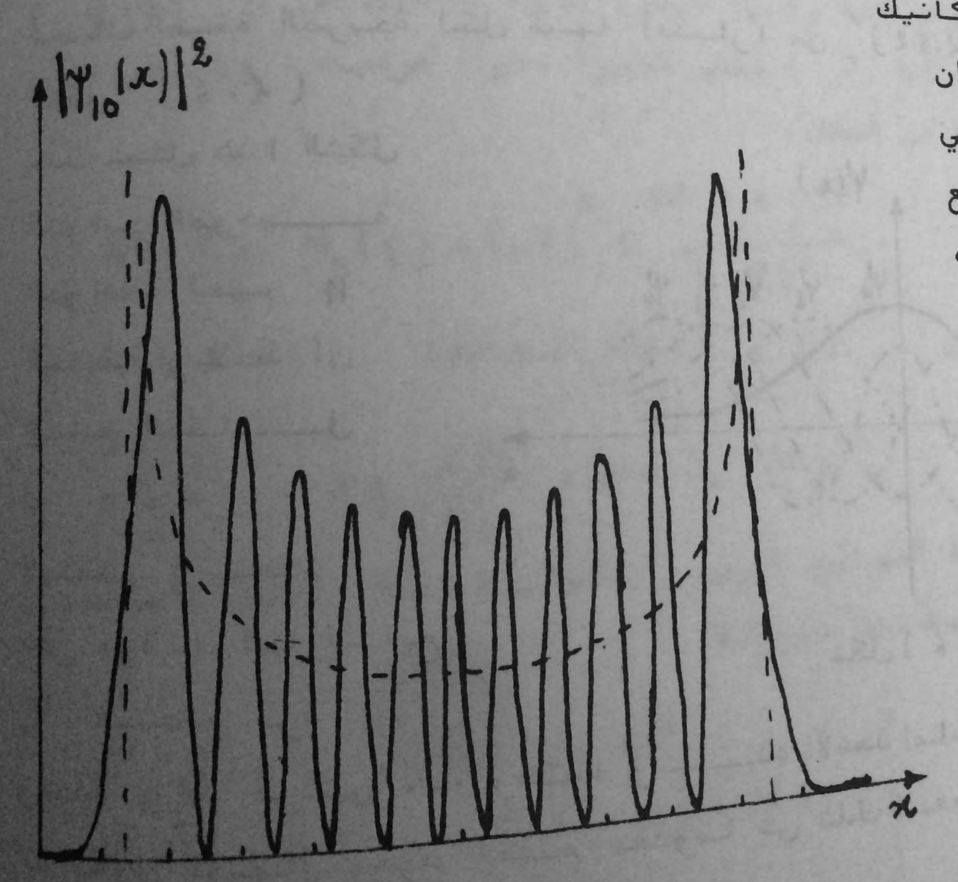


شكل (2.7)



شكل (2.8)

أما حسب الميكانيك الكلاسيكي فإن وجود الجسيم في مكان ما تابع للزمن الذي يقضيه في ذلك المكان وبما أنه في حالة الهزاز التوافقي ستكون هذه المدة عندما يكون المطال أعظمياً فإن الاحتمال الكلاسيكي W_{cl}.



شكل (2.9)

سيكون أكبر هناك وبالتالي يمكن رسم الخط البياني المنقط المقابل لـ $W_{cl.}$ في الشكلين (2.7) و (2.8). وأخيراً يمكن أن نلاحظ أن الاحتمال الكوانتي W_q يقترب من $W_{cl.}$ عندما تزداد n وتزداد عقد التابع ψ فنحصل على الشكل (2.9) وهذه نتيجة متوقعة حسب مبدأ التطابق اذ أن ازدياد n معناه صغر المقدار $\Delta E / E$ (اقتراب سويات الطاقة بالنسبة لقيمتها).

جـ - الهزاز التوافقي ذو الأبعاد الثلاثة :

Harmonic oscillator in 3 - dementions)

(Oscillateur harmonique à trois dimension

كثيراً ما نحتاج الى دراسة الهزاز التوافقي في ثلاثة أبعاد فراغية حيث يهتز الجسيم على ثلاثة محاور x, y, z وعندئذ يمكن تعميم النتائج السابقة بالشكل التالي :

يعطى الكمون في هذه الحالة بالعلاقة :

$$V(x,y,z) = \frac{m\omega_1^2}{2} x^2 + \frac{m\omega_2^2}{2} y^2 + \frac{m\omega_3^2}{2} z^2 \qquad (2.57)$$

ويمكن كتابة معادلة شرودنغر الموافقة :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \frac{m}{2} \left(\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2 \right) \psi = E \psi \qquad (2.58)$$

وبما أن المؤثر التفاضلي قد انقسم الى ثلاثة أقسام فيمكن تفريق المعادلة السابقة الى ثلاث معادلات من الشكل (2.39) أي :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_i(x_i)}{d x_i^2} + \frac{m\omega_i^2}{2} x_i^2 \psi_i(x_i) = E_i \psi_i(x_i) \qquad (2.59)$$

حيث :

$$x_1 \equiv x, \quad x_2 \equiv y, \quad x_3 \equiv z, \quad i = 1, 2, 3$$

أما الحل العام للمعادلة (2.58) فيمكن كتابته كتعميم للنتائج السابقة حيث نجد :

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x_1, x_2, x_3) = \left(\frac{m^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3}{\hbar^3 \pi^3}\right)^{1/4} \left[\frac{2^{-(n_1+n_2+n_3)}}{n_1!\, n_2!\, n_3!}\right]^{1/2} e^{-\frac{1}{2}(\eta_1^2+\eta_2^2+\eta_3^2)}$$

$$H_{n_1}(\eta_1)\, H_{n_2}(\eta_2)\, H_{n_3}(\eta_3) \quad (2.60)$$

$$\left(\eta_i = \sqrt{\frac{m\omega_i}{\hbar}}\, x_i\right)$$

اما الطاقة فستكون من الشكل :

$$E = \left(n_1 + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_1 + \left(n_2 + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_2 + \left(n_3 + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_3 \quad (2.61)$$

وفي الحالة الخاصة عندما تتساوى تواترات الاهتزاز حول المحاور الاحداثية x, y, z أي $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega$ يكون :

$$E_n = \left(n + 3/2\right)\hbar\omega, \quad (n = n_1 + n_2 + n_3) \quad (2.61)'$$

أي أن E_n تتعلق بمجموع الأعداد الكوانتية n_1, n_2, n_3 فاذا أخذت n قيمة معينة فاننا نجد مجموعة من الأعداد n_i مجموعها يعطي n وهذا يعني أن سويات الطاقة هنا منطبقة أيضاً كما في حالة حفرة الكمون (ما عدا الحالة التي يكون فيها $n = 0$).

ولحساب درجة الانطباق ينبغي حساب عدد الحالات الممكنة للأعداد $n_i\ (i = 1, 2, 3)$ بحيث يكون $n = n_1 + n_2 + n_3$ ولذلك نثبت n_1 (بالاضافة الى n طبعاً) فنلاحظ عندئذ أن هذا العدد يساوي عدد الحالات الممكنة للمقدار $n_2 + n_3$ الذي يمكن أن يأخذ القيم من الصفر الى $n - n_1$ أي $0, 1, 2, \ldots, (n - n_1)$ وعددها $n - n_1 + 1$ قيمة فاذا جمعنا الآن بالنسبة لـ n_1 التي يمكن أن تتحول من الصفر حتى n نجد أن عدد الحالات الممكنة للمجموع $n_1 + n_2 + n_3$ (درجة الانطباق) هو :

$$\sum_{n_1=0}^{n} (n - n_1 + 1)$$

وهي سلسلة عددية أساسها الواحد وعدد حدودها $(n+1)$ حداً (لأن n_1 يمكن أن تأخذ كل القيم من 0 (أصغر قيمة) الى n (أكبر قيمة، تقابل اصغر قيمة للعددين n_2, n_3 حيث يساوي كل

منهما الصفر) .

وهكذا يكون مجموع المتوالية السابقة هو :

$$\frac{1}{2}(n+1+1)(n+1) = \frac{1}{2}(n+1)(n+2) \qquad (2.62)$$

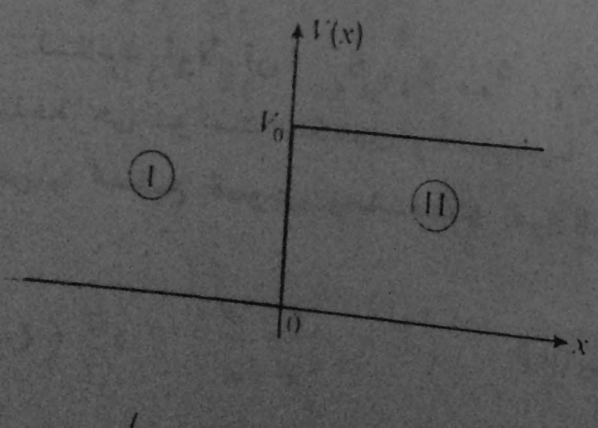
وهذا يعني أن سوية الطاقة ذات الرقم n ستكون موءلفة من انطباق $\frac{1}{2}(n+1)(n+2)$ سوية طاقة .

15 – نفوذية وانعكاس الجسيمات على حاجز الكمون :

قد يتحرك الجسيم في حقل كمون من نوع خاص فهو لايتأثر بهذا الحقل الا عندما يقع ضمن منطقة معينة ، فعندما نقذف بروتونا باتجاه النواة الموجبة فلا بد أن يخضع لتأثيرها الدافع عندما يقع في مجالها الكهربائي (حاجز كمون كهربائي) واذا كانت طاقة البروتون كافية واستطاع التغلب على هذا الحاجز مندفعاً باتجاه مركز النواة فهو سيتأثر فيما بعد بحقل كمون النواة (حاجز كمون نووي) . وسندرس الآن أبسط هذه الحالات ولكنها،برغم بساطتها،تفسر كثيراً من الظواهر الفيزيائية في هذا المجال .

فلنفرض حاجزاً للكمون يمكن أن يمثل جبرياً بالعلاقة :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{if} \quad x < 0 \\ V_0 & \text{if} \quad x > 0 \end{cases} \qquad (2.63)$$



شكل (2.10)

وهذا يمثل بيانا كما في الشكل (2.10) .

ولندرس سلوك جسيم مجهري يتأثر بهذا الكمون ولذلك نكتب معادلة شرودنغر الموافقة :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi = E\Psi$$

وفي حالتنا هذه ينبغي كتابة معادلتين موافقتين لـ $x \leq 0$ أو $x > 0$ هما التاليتين :

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0 \quad : \quad x \leq 0 \text{ (a) I في المجال}$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k'^2\Psi = 0 \quad : \quad x > 0 \text{ (b) II في المجال} \qquad (2.64)$$

حيث :

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \text{ (a)} \text{ ، } k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) \text{ (b)} \qquad (2.65)$$

أما حل المعادلتين (2.64) فيكتب في الحالة العامة :

$$\Psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad \text{(a)}$$

$$\Psi_2(x) = A_2 e^{ik'x} + B_2 e^{-ik'x} \quad \text{(b)} \qquad (2.66)$$

من المعلوم أن e^{ikx} تمثل موجة مستوية (كما رأينا في الفصل الأول) تتجه بالاتجاه الموجب للمحور $0x$ أما e^{-ikx} فتمثل موجة مستوية أيضاً ولكنها تتجه بالاتجاه السالب للمحور $0x$، وبالتالي فكل من التابعين Ψ_1 , Ψ_2 موءلف من موجتين مستويتين تنتشران باتجاهين متعاكسين وسنناقش ذلك بتفصيل أكثر فيما يلي :

لنلاحظ أولاً أن A_1, A_2, B_1, B_2 الممثلة لسعات الموجات المختلفة هي ثوابت التكامل وسنعينها من الشروط الحدية وشروط استمرار التابع الموجي ومشتقاته في النقطة $x = 0$ اذ أن :

$$\Psi_1(0) = \Psi_2(-0) \quad \text{(a)}$$

$$\Psi'_1(0) = \Psi'_2(-0) \quad \text{(b)} \qquad (2.67)$$

وقبل أن نبدل المعادلتين (2.67) في (2.66) يمكن البرهان أن الثابت $B_2 = 0$ في الحالتين $E < V_0$ ، $E > V_0$ (حيث E طاقة الجسيم الوارد) ؛ فعندما $E < V_0$ نجد من (2.65-b) أن $k'^2 < 0$ أي k' عدد تخيلي وعندئذ يصبح المقدار $e^{ik'x}$ من الشكل $e^{\alpha x}$ حيث α عدد حقيقي موجب وهذا يعني أن التابع $\psi(x > 0)$ يصبح لامتناهياً عندما $x \to \infty$ وهذا غير ممكن بسبب محدودية التابع الموجي . أما اذا كان $E = V_0$ فان $k' = 0$ وعندئذ يساوي التابع ψ مقداراً ثابتاً ، وهي حالة خاصة لاتستدعي الاهتمام أما اذا كان $E > 0$ فان $k'^2 > 0$ وبالتالي k' حقيقي وهذا يعني وجود موجة مستوية في المجال II متجهة بعكس اتجاه $0x$ وهو غير ممكن لأنه لاتوجد ضمن المجال II سوى الموجة النافذة المتجهة باتجاه $0x$ اذ ليس هناك أي حاجز في المجال II ليعكسها .

لنعد الآن الى المعادلتين (2.67) ونميز حالتين :

آ - اذا كانت طاقة الجسيم الوارد أكبر من ارتفاع حاجز الكمون أي $E > V_0$ فنجد بالتبديل في (2.67) (بعد حساب المشتقات) المعادلتين :

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 \\ k(A_1 - B_1) &= k' A_2 \end{aligned} \qquad (2.68)$$

لندرس الحالة الخاصة عندما $A_1 = 1$ (سعة الموجة الواردة تساوي واحدة السعة) فعندئذ يمكن كتابة المعادلتين (2.68) بالشكل:

$$\begin{aligned} 1 + B_1 &= A_2 \\ k(1 - B_1) &= k' A_2 \end{aligned} \qquad (2.68)'$$

وهما تحويان مجهولين فقط هو B_1 ، A_2 يسهل تعيينها فنجد:

$$B_1 = \frac{k - k'}{k + k'} \quad , \quad A_2 = \frac{2k}{k + k'} \qquad (2.69)$$

أي أن سعة الموجة المنعكسة $B_1 \neq 0$ مما يدل على وجودها رغم أن طاقة الجسيم أكبر من ارتفاع حاجز الكمون ولا تنعدم B_1 الا في الحالة التي يكون فيها $k = k'$ ويتحقق ذلك (لاحظ (2.65)) عندما $V_0 = 0$ وهذا يعني ، فيزيائياً ، عدم وجود أي حاجز للكمون، وهذه نتيجة منطقية لأننا سنحصل على موجة مستوية e^{ikx} تتحرك في الاتجاه ox وليس هناك ما يجعلها (أو يجعل قسما منها) يرتد بعكس الاتجاه ox .

نسمي نسبة كثافة تيار الجسيمات المنعكسة J_R على الحاجز، الى كثافة تيار الجسيمات الواردة J_0 عامل الانعكاس R . أما نسبة تيار الجسيمات النافذة ضمن الحاجز J_D الى تيار الجسيمات الواردة فيسمي عامل النفوذ D ولحساب كل من J_R , J_D يمكن أن نجد انطلاقاً من التعريف (2.12) أن :

$$J_R = \frac{\hbar k}{m} |B_1|^2 \quad , \quad J_D = \frac{\hbar k}{m} |A_2|^2 \tag{2.70}$$

وبما أن J_0 (كثافة تيار الجسيمات الواردة) تساوي $\hbar k/m$ لأن $A_1 = 1$ فنجد بعد تبديل (2.69) في (2.70) أن :

$$R = \frac{J_R}{J_0} = \left| \frac{k-k'}{k+k'} \right|^2 \tag{2.71}$$

عامل الانعكاس

$$D = \frac{J_D}{J_0} = 4k \left| \frac{k'}{k+k'} \right|^2 \tag{2.72}$$

عامل النفوذ

وهكذا نجد في هذه الحالة (عندما $E > V_0$ وبالتالي $k' > 0$) أن :

$$R + D = \frac{k^2 + k'^2 - 2kk'}{k^2 + k'^2 + 2kk'} + \frac{4kk'}{k^2+k'^2+2kk'} = 1 \tag{2.73}$$

أي يساوي الواحد كما يجب أن يكون وهذا يعبر عن قانون حفظ عدد

الجسيمات .

ب - اذا كانت طاقة الجسيم الوارد أصغر من ارتفاع حاجز الكمون $E < V_0$ نجد أن k' تصبح عقدية (تخيلية) ويمكن كتابتها بالشكل $k = i\varkappa$ حيث $\varkappa$ عدد حقيقي يعطى بالعلاقة :

$$\varkappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)} \qquad (2.74)$$

ويصبح عامل الانعكاس R في هذه الحالة :

$$R = \left|\frac{k - i\varkappa}{k + i\varkappa}\right|^2 = \frac{(k - i\varkappa)(k + i\varkappa)}{(k + i\varkappa)(k - i\varkappa)} = 1 \qquad (2.75)$$

أما عامل النفوذ D فينعدم لأن :

$$D = 1 - R = 0 \qquad (2.76)$$

والموجة المنعكسة يمكن أن تكتب على الشكل :

$$\psi_k(x) = B_1 e^{-ikx} = \frac{k - i\varkappa}{k + i\varkappa} e^{-ikx} = e^{-i(kx + \delta)} \qquad (2.77)$$

مع العلم δ فرق الطور الحادث نتيجة للانعكاس، ويمكن حسابه بسهولة من (2.77) حيث نجد :

$$\delta = \operatorname{arctg} \frac{2k\varkappa}{k^2 + \varkappa^2} \qquad (2.78)$$

وأخيراً يجب التأكيد على خاصة هامة من خواص الجسيمات المجهرية. وهي أنه بالرغم من أن عامل الانعكاس يساوي الواحد فالتابع الموجي لاينعدم في المنطقة II وهو يساوي :

$$\psi_D(x) = A_2 e^{ik'x} = \frac{2k}{k + i\varkappa} e^{-\varkappa x} \qquad (x > 0) \qquad (2.79)$$

واحتمال وجود الجسيم هناك ليس معدوماً لأن :

$$|\psi_0(x)|^2 = \frac{4k^2}{k^2+\varkappa^2} e^{-2\varkappa x} \neq 0$$

(2.80)

وهذا يؤكد اختلاف السلوك الفيزيائي للجسيمات المجهرية عن الجسيمات المتحركة حسب قوانين الكلاسيكية ، اذ من المعلوم أن الجسيمات الميكانيك الكلاسيكي لايمكن أن تصل الى المنطقة II $(x>0)$ الا اذا كانت طاقتها أكبر من ارتفاع حاجز الكمون $E>V_0$ ولكنها يمكن أن توجد هناك (!) حسب قوانين ميكانيك الكم طبقاً لـ (2.80) وهذا يسمى ظاهرة النفق (Tunnel - effect).

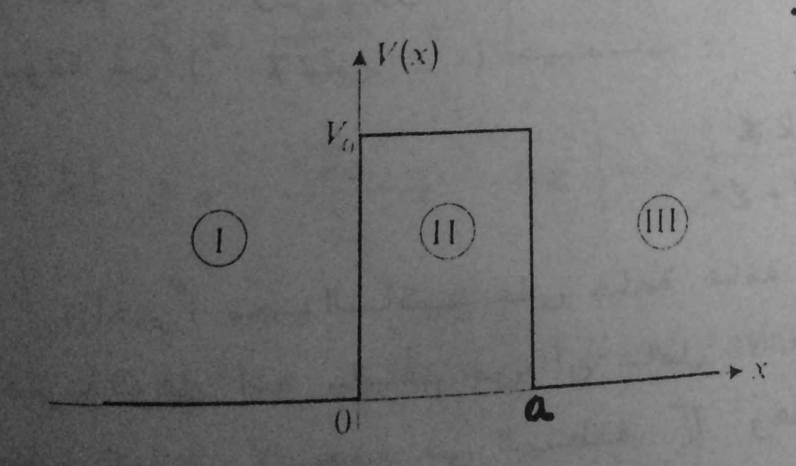
ويمكن البرهان أن المسافة التي يقطعها الجسيم في المجال II $(x>0)$ تتناسب مع $\frac{1}{\varkappa}$ وذلك انطلاقاً من علاقات الشك ، ثم حساب المسافة التي يقطعها الكترون اذا كان الفرق V_0-E بالنسبة له يساوي 1eV فنجد بسهولة :

$$\delta x \simeq \frac{\hbar}{\Delta p} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}} = \frac{10^{-27}}{\sqrt{2\times10^{-27}\times1.6\times10^{-12}}} \simeq 10^{-8}\ cm.$$

من المفيد في نهاية هذه الفقرة دراسة سلوك جسيم عندما يتعرض لحاجز كمون ذي عرض محدود كما في الشكل (2.11) :

وسيكون عندنا ثلاث مناطق .

ويسهل دراسة هذه الحالة كتعميم الحالة السابقة اذ نجد التوابع الموجية التالية الموافقة للمناطق الثلاث :



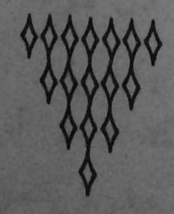
شكل (2.11)

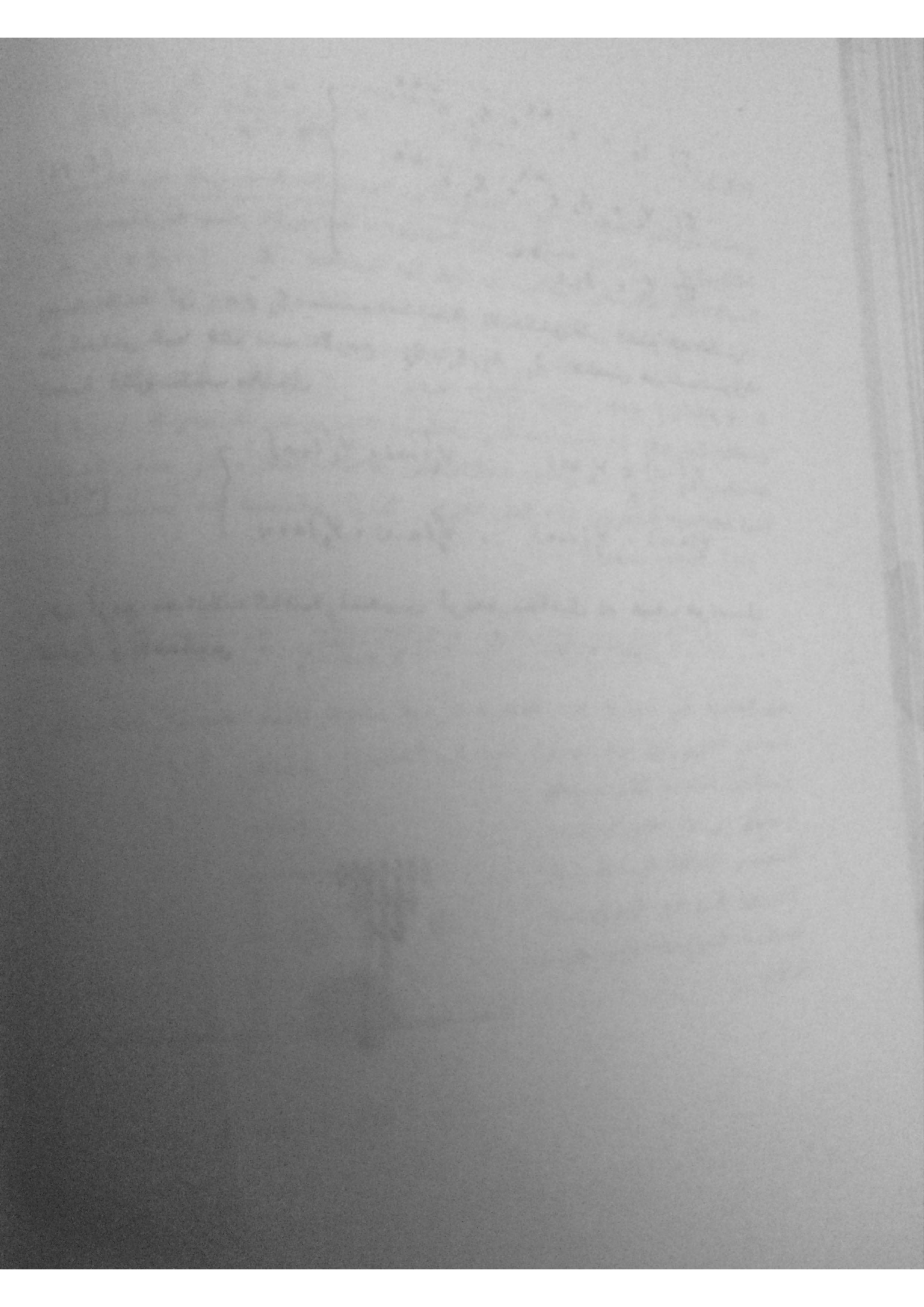
$$\left.\begin{aligned} &I)\quad \Psi_1 = e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \\ &II)\quad \Psi_2 = A_2 e^{ik'x} + B_2 e^{-ik'x} \\ &III)\quad \Psi_3 = A_3 e^{ikx} \end{aligned}\right\} \qquad (2.81)$$

وهنا نلاحظ أن $B_2 \neq 0$ بسبب امكانية الانعكاس على القسم الداخلي من الحاجز أما الثوابت الأربع A_2, A_3, B_1, B_2 فتعين من شروط الحدية التي تكتب بالشكل :

$$\left.\begin{aligned} &\Psi_1(-0) = \Psi_2(+0) \quad , \quad \Psi_1'(-0) = \Psi_2'(+0) \\ &\Psi_2(a-0) = \Psi_3(a+0) \quad , \quad \Psi_2'(a-0) = \Psi_3'(a+0) \end{aligned}\right\} \qquad (2.82)$$

وهي أربع معادلات كافية لتعيين أربعة مجاهيل ثم حساب عوامل النفوذ و الانعكاس .





مسائل الفصل الثاني

1 ـ يتحرك الكترون في حفرة كمون لانهائية العمق ذات بعد واحد، عرضها l .

احسب احتمال وجود هذا الالكترون في الثلث الثاني من الحفرة علماً أنه موصوف بالتابع الموجي :

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{2\pi}{l} x$$

2 ـ يسقط تيار من الالكترونات وحيدة الطاقة على حاجز كمون .

احسب ارتفاع هذا الحاجز اذا علمت أن 4% من الالكترونات الواردة على الحاجز ، ينعكس عنه .

3 ـ أوجد القسم الزمني من حل معادلة شرودنغر غير المستقرة مع العلم أن لهذه المعادلة الشكل التالي :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E \psi$$

4 ـ يوضع التابع الموجي الذي يصف جسيماً في حفرة كمون لانهائية العمق بالشكل :

$$\psi(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx} \qquad \left(k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \right)$$

آ ـ احسب انطلاقاً من شرط التنظيم وشروط محدودية التابع الموجي كلا من c_1 و c_2 .

ب ـ احسب الطاقة E_n ثم أوجد التوابع الموجية الخاصة المنظمة.

5 ـ يتحرك الكترون في حفرة كمون لانهائية عرضها l .

أوجد النقط التي يتساوى فيها احتمال وجود الالكترون على السوية الأولى والثانية .

أحسب هذا الاحتمال ووضح ذلك بيانياً .

6 ـ ليكن الهزاز التوافقي المشحون والموضوع في حقل كهربائي $\vec{E}$ ثابت .

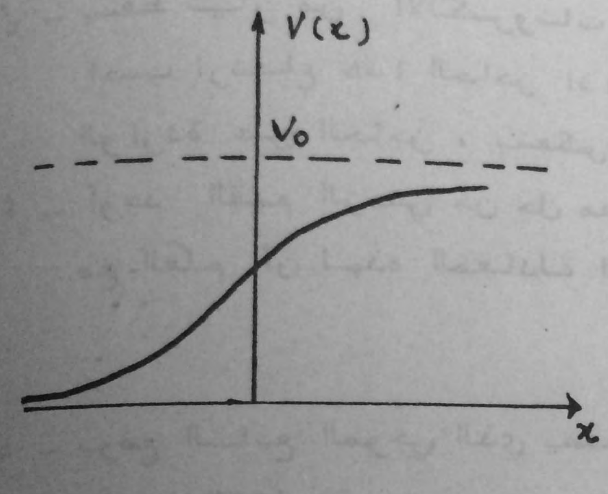
أوجد التوابع الموجية وسويات الطاقة له استناداً الى معرفتك بالهزاز التوافقي الذي درسته في هذا الفصل .

7 ـ برهن أن التوابع الموجية لجسيم في حفرة كمون تحقق العلاقة :

$$\langle \psi_n | \psi_{n'} \rangle = \langle n | n' \rangle = \delta_{nn'}$$

8 ـ أعد السؤال نفسه للتوابع الخاصة للهزاز التوافقي .

9 ـ احسب كثافة التيار الاحتمالي J عندما $x = \pm\infty$ وذلك عند ورود الجسيمات على الحاجز التالي ، شكل (2.12) :



$V = 0$ في $x = -\infty$

$0 < V < V_0$ في $x \neq \pm\infty$

$V = V_0$ في $x = +\infty$

شكل (2.12)

ثم برهن أن التيار الاحتمالية $J(\pm\infty)$ والكثافة الاحتمالية $\rho(\pm\infty)$ يحققان العلاقة :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} J = 0$$

10 ـ احسب التوابع الموجية الموافقة للحالات الثلاث $(n = 0, 1, 2, 3)$ مستفيداً من العلاقة العامة (التوابع الخاصة للهزاز التوافقي)

$$\psi_n = (-1)^n A_n \, e^{\frac{1}{2}\eta^2} \frac{d^n e^{-\eta^2}}{d\eta^n}$$

ثم ارسم هذه التوابع واستنتج الكثافة الاحتمالية لوجود الهزاز في نقطة ما من الفراغ في الحالات الثلاث السابقة ، ثم عمم ذلك عندما $n \to \infty$.

11 - يتحرك جسيم في حفرة كمون ذات بعدين W , L .

آ - أوجد التابع الموجي المنظم الذي يصف هذا الجسيم عندما $n_x = 1$, $n_y = 2$.

ب - برهن أن طاقته الكلية يمكن أن تكتب بالشكل :

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}\left[\frac{a^2}{L^2} + \frac{b^2}{W^2}\right]$$

حيث a, b أعداد صحيحة زوجية وموجبة .

12 - تعرف القيمة الوسطى لموءثر ما $\hat{A}$ بالعلاقة (انظر الفصل الثالث) :

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi \, dV$$

يطلب حساب القيمة الوسطى لـ x وذلك لجسيم يتحرك في حفرة كمون عرضها l .

13 - ليكن التابع الموجي الذي يصف جسيم :

$$\Psi(r) = C e^{-\frac{r}{a}}$$

آ - احسب C ثابت التنظيم .

ب - احسب المسافة r التي من أجلها يكون احتمال وجود هذا الجسيم أكبر ما يمكن .

14 - تسقط حزمة من الجسيمات طاقتها E على حاجز كمون من الشكل :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{if } x < 0 \\ V_0 & \text{if } x > 0 \end{cases}$$

احسب معامل الانعكاس R . واذا علمت أن $E = 100\ eV$

فاحسب ارتفاع حاجز الكمون .

15 - هزاز توافقي ذو بعد واحد طاقته $E = \frac{5}{2}\hbar\omega$

احسب متوسط طاقته الكامنة V ومتوسط طاقته الحركية T

مع العلم أن :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \eta^{2n} e^{-\alpha \eta^2} d\eta = \frac{1.3.5 \ldots (2n-1)}{2^n} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{2n+1}}}$$

16 - يتحرك هزاز توافقي ذي بعدين في الكمون التالي :

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega_1^2 x^2 + \frac{1}{2} m\omega_2^2 y^2$$

احسب سويات الطاقة والتوابع الموجية التي تصف هذا الهزاز بالاستفادة من دراستك للهزاز التوافقي ذي البعد الواحد، ادرس الحالة الخاصة عندما $\omega_1 = \omega_2$. هل تكون سويات الطاقة منطبقة عندئذ؟ اذا كان ذلك فاحسب رتبة انطباقها.

17 – ليكن n, n' متجهان خاصان للموءثر $\hat{H}$ في حالة الهزاز التوافقي حيث:

$$|n\rangle = \psi_n = c_n \, e^{-\frac{1}{2}\eta^2} H_n(\eta)$$

$$H_n(\eta) = (-1)^n e^{\eta^2} \frac{d^n e^{-\eta^2}}{d\eta^n} \quad , \quad \eta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x .$$

آ – احسب ثابت التنظيم c_n.

ب – برهن بالاستناد الى عبارة كل من $|n'\rangle$ و $|n\rangle$ أن:

$$\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$$

جـ – هل يمكن نشر أي تابع $f(x)$ بواسطة المتجهات $|n\rangle$؟ ولماذا؟ واذا كان مثل هذا النشر ممكنا فانشر التابع $\delta(x)$.

18 – أُحسب عامل النفوذ ضمن كامل الحاجز التالي:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{if } x \leq b/2 \\ V_0 & \text{if } b/2 \leq x \leq a/2 \\ 0 & \text{if } x \geq a/2 \end{cases}$$

ماذا يحدث في الحالة الخاصة عندما يكون V_0 كبيراً جداً.

19 – أُوجد سويات الطاقة والتوابع الخاصة لجسيم يتحرك في حفرة كمون من الشكل:

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & \text{if} \quad a < x \leq 0 \ , \quad b < y \leq 0 \\ \infty & \text{if} \quad x \geq a \ , \quad b < y \leq 0 \end{cases}$$

ادرس الحالة الخاصة عندما $a = b$ (حفرة كمون مربعة ذات بعدين متساويين) .

ادرس سويات الطاقة وبرهن أنها منطبقة ، ثم احسب رتبة الانطباق .

20 ـ احسب متوسط كمية حركة جسيم يتحرك في الكمون $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$.

21 ـ برهن أن متوسط كمية حركة جسيم يتحرك في حفرة كمون لانهائية العمق وذات بعد واحد يساوي الصفر .

22 ـ اوجد التوابع الموجية الخاصة لموءثر كمية حركة جسيم يتحرك في حفرة كمون ذات بعد واحد . هل يمكن أن يكون التابع الموجي المقابل لموءثر الطاقة تابعًا خاصًا لكمية الحركة أيضًا ؟

23 ـ في اللحظة $t = 0$ يوصف جسيم بالتابع التالي :

$$\Psi(x,0) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2} + i k_0 x}$$

آ ـ احسب A وكثافة الاحتمال ρ ثم عين المجال حيث يتحرك الجسيم واحسب كثافة التيار الاحتمالي J .

ب ـ احسب عوامل نشر فورية للتابع $\Psi(x,0)$ ، باستخدام العلاقة :

$$\Psi(x,0) = \int C(k) e^{ikx} dk$$

ثم برهن أن $|\Psi(x,0)|^2 = |C(k)|^2$ (علاقة بارسيفال) .

ج ـ احسب $\langle(\Delta x^2)\rangle$ ، $\langle(\Delta P_x)^2\rangle$ وتأكد من صحة علاقات الشك .

24 ـ يخضع جسيم للكمون التالي (حفرة كمون غير متناظرة) :

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & \text{if} \quad x < 0 & (\text{المنطقة I}) \\ 0 & \text{if} \quad 0 < x < a & (\text{المنطقة II}) \\ V_2 & \text{if} \quad x > a & (\text{المنطقة III}) \end{cases}$$

احسب القيم الخاصة والتوابع الخاصة لموءثر هاملتون لهـذا الجسيم اذا علمت أن طاقته تحقق العلاقة $0 < E < V_1 < V_2$.

٤٥ - يجتاز جسيم طاقته E حاجز كمون من الشكل :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{if} \quad x < 0 \\ V_0 & \text{if} \quad 0 < x < a \\ 0 & \text{if} \quad x > a \end{cases}$$

(المنطقة I)
(المنطقة II)
(المنطقة III)

فاذا علمت أن عامل النفوذ هو نسبة كثافة تيار الجسيمات النافذة J_D على كثافة تيار الجسيمات الواردة J_0 أي $D = J_D / J_0$. وبالطريقة نفسها تعرف عامل الانعكاس $R = J_R / J_0$.

آ - برهن أن الحل العام لمعادلة شرودنغر في المناطق الثلاث المذكورة آنفاً يكتب بالشكل :

$$\Psi_I = A e^{ik'x} + B e^{-ik'x}, \quad \Psi_{II} = C e^{ikx} + D e^{-ikx},$$

$$\Psi_{III} = E e^{ikx} + F e^{-ikx}, \quad k = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}, k' = \sqrt{2mE/\hbar^2}.$$

ب - احسب عوامل النفوذ والانعكاس وذلك بعد حساب الثوابت A, B, C, D, E, F باستخدام شروط استمرار التابع Ψ ومشتقاته على الحدود وما تراه مناسباً من شروط أخرى ، ميّز الحالتين $E > 0$ ، $E < 0$.

جـ - ادرس الحالة الخاصة عندما ينتهي عرض الحاجز (أي a) الى اللانهاية.

د - ادرس بصورة خاصة الحالات الأربع التالية :

- $E \to \infty$ (أو عملياً ، $E >> V_0$)
- حاجز قليل الشفافية أي يحقق العلاقة : $\frac{(V_0 - E) m a^2}{\hbar^2} >> 1$.
- $E \to 0$ (أو عملياً ، $E << V_0$). $E << \frac{m a^2 V_0}{\hbar^2}$ وبالتالي
- $\frac{1}{\hbar^2} m a^2 V_0 << 1$ ، $\frac{1}{\hbar^2} m a^2 E << 1$.

٢٦ - احسب عاملي النفوذ و الانعكاس لجسيمات تتحرك في كمون من الشكل : $V(x) = \alpha\,\delta(x)$.

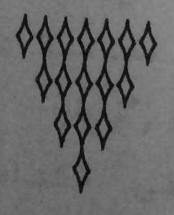
٢٧ - اوجد حل معادلة شرودنغر لجسيم خاضع للكمون التالي :

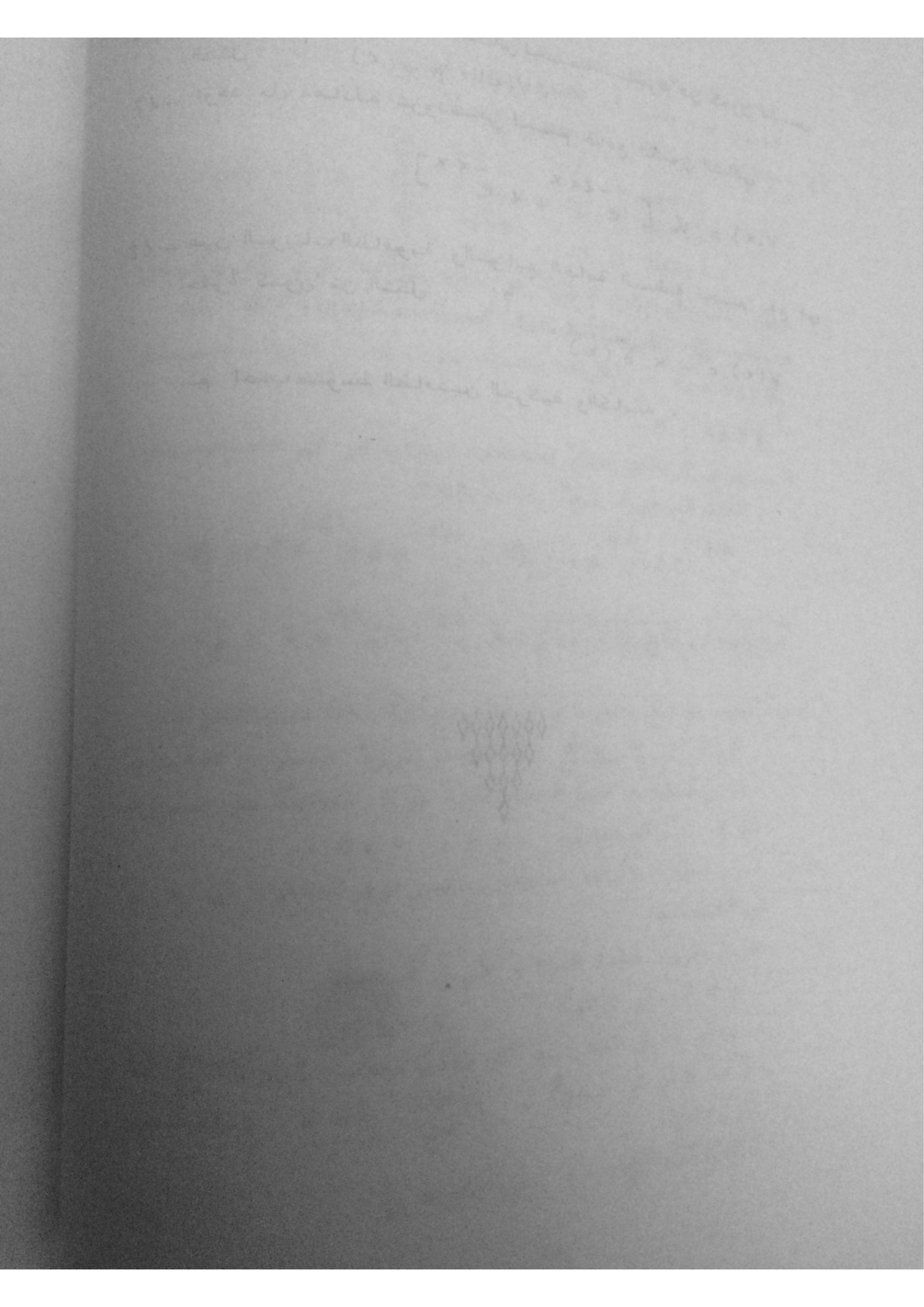
$$V(x) = V_0 \left[e^{-2\alpha x} + 2\, e^{-\alpha x} \right]$$

٢٨ - عين السويات الطاقوية والتوابع الخاصة المنظمة لجسيم يقع في حفرة كمون من الشكل :

$$V(x) = -\,\alpha\,\delta(x)$$

ثم احسب متوسط الطاقتين الحركية والكامنة .





الفصل الثالث

الأسس الرياضية - الفرضيات الأساسية

لقد درسنا في الفصل الأول الأسس الفيزيائية لميكانيك الكم وحصلنا في الفصل الثاني على معادلة شرودنغر التي يوءدي حلها الى حساب التابع الموجي $\psi(\vec{r}, t)$ هذا التابع الذي اذا ضربناه بمرافقه $\psi^*(\vec{r}, t)$ نحصل على الكثافة الاحتمالية لوجود الجسيم في اللحظة t ، في النقطة المعينة بمتجه الموضع $\vec{r}$ ، وأن الشروط الحدية الموضوعة على هذا التابع الموجي ومشتقاته توءدي الى حساب ثابت النظم وطاقة الجسيم ·

وبالرغم من أن الأداة الرياضية المستخدمة في الفصلين السابقين كانت كافية لتفسير بعض الظواهر في العالم المجهري ؛ كحساب طاقة الجسيم في حفرة كمون وطاقة هزاز توافقي وحساب التوابع الموجية المقابلة لذلك ، الا أن هذه الأداة ليست كافية لحساب القيم الوسطى للموءثرات،تلك القيم التي ترتبط مباشرة ، كما

سنرى ، بنتائج القياسات المخبرية ، وهي ليست كافية أيضاً لتفسير
اشعاع المجموعات المجهرية وتفسير وجود العزم الذاتي (السبيـن)
عند بعض الجسيمات وما ينتج عنه • ولهذا كان لا بد من تطويـر
الأداة الرياضية لميكانيك الكم بحيث يبنى هذا العلم على أسـس
وفرضيات متينة ،وهذا ما سندرسه في هذا الفصل •

16 – تعاريـف – I – :

آ – يعرف المؤثربأنه مجموعة القواعد الناظمة لتحويـل
تابع ما $\psi(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ الى تابع آخر $\varphi(x_1, x_2, \ldots, x_n)$
لنفس المتحولات •

لنأخذ على سبيل المثال المؤثر :

$$\hat{A} = \hat{a} + b \frac{d}{dx} \qquad (3.1)$$

فهو يحول التابع $f(x)$ الى تابع آخر $\varphi(x)$ طبقا للعلاقـة :

$$\hat{A} f(x) = \left(\hat{a} + b \frac{d}{dx}\right) f(x) = a f(x) + b \frac{df}{dx} = \varphi(x) \qquad (3.2)$$

أما المؤثر $\hat{B} = \left(x \frac{\partial}{\partial x}\right)^2$ فهو يحول التابع $f(x)$ الى تابع آخر $g(x)$
طبقاً لما يلي :

$$\left(x \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 f(x) = x \frac{\partial}{\partial x} x \frac{\partial}{\partial x} f(x) =$$

$$= x\left(\frac{\partial f}{\partial x} + x \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right) = x \frac{\partial f}{\partial x} + x^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = g(x) \qquad (3.3)$$

أي أن المؤثر $\hat{B}$ يمكن أن يوضع بالشكل :

$$\hat{B} = x \frac{\partial}{\partial x} + x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

أما مؤثر هاملتون الذي استخدم في الفصل السابق فهـو :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{V}(x) \qquad (3.4)$$

وهو يحول التابع Ψ الى تابع آخر حسب القاعدة :

$$\hat{A}\Psi = E\Psi$$

وهي كما رأينا ، معادلة تفاضلية (معادلة شرودنغر) كافية لحساب Ψ وايجاد قيم الطاقة E .

ب — يكون الموءثر $\hat{A}$ خطيًا اذا حقق العلاقة :

$$\hat{A}(\alpha f + \beta g) = \alpha \hat{A} f + \beta \hat{A} g \quad : (\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}) \qquad (3.5)$$

مثال على ذلك : موءثرات الجداء التي ينحصر تأثيرها على التابع Ψ بضربها فيه ، والموءثرات التفاضلية $\frac{d^n}{dx^n} : (\forall n \in \mathbb{Z})$

ج — يعرف مجموع موءثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ بانه الموءثر $\hat{C}$ الذي يكافىءتأثيره على التابع Ψ ، تأثير الموءثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ أي :

$$(\hat{A} + \hat{B})\Psi = \hat{C}\Psi \Rightarrow \hat{C} = \hat{A} + \hat{B} \qquad (3.6)$$

لنأخذ ، على سبيل المثال ، الموءثر $\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r$ ولنحسب تأثيره على التابع $\Psi(r, \theta, \varphi)$ فنجد :

$$\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r\right)\Psi = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\Psi + r\frac{\partial \Psi}{\partial r}\right) =$$

$$= \frac{1}{r}\frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{1}{r}\left(\frac{\partial \Psi}{\partial r} + r\frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2}\right) = \left(\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2}\right)\Psi \qquad (3.7)$$

فالموءثر في الطرف الأيسر هو مجموع الموءثرين ضمن القوس في الطرف الأيمن أي أن :

$$\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r = \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2}$$

د — جداء موءثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ هو الموءثر $\hat{C}$ الذي يكافىء تأثيره تأثير الموءثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ أي أن :

$$\hat{C}\Psi = \hat{A}\hat{B}\Psi \qquad (3.8)$$

وليس من الضروري أن يتساوى المقداران $\hat{A}\hat{B}$ و $\hat{B}\hat{A}$ أي أن :

$$\hat{A}\hat{B}\Psi \neq \hat{B}\hat{A}\Psi$$

هـ - ان مبدّل الموءثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ هو موءثر جديد يرمز له بالرمز $[\hat{A},\hat{B}]$ ويعرف بالعلاقة :

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (3.9)$$

ويقال عن الموءثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ أنهما تبادليان عندما ينعـــدم مبدّلهـا ، وعندئذ :

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \Leftrightarrow \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \quad (3.10)$$

أما اذا كان لدينا مبدّل من النوع $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = -[\hat{B}\hat{C},A]$ فمن السهل برهان صحة العلاقة :

$$[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A},\hat{C}] = -[\hat{B},\hat{A}]\hat{C} - \hat{B}[\hat{C},\hat{A}] \quad (3.11)$$

و - يعرف موءثر الواحدة $\hat{I}$ بالعلاقة :

$$\hat{I}\Psi = \Psi \quad (3.12)$$

أما الموءثر المعاكس لموءثر ما $\hat{M}$ فيعرف بالعلاقة :

$$\hat{M}\hat{M}^{-1}\Psi = \hat{M}^{-1}\hat{M}\Psi = \Psi \quad (3.13)$$

ومن الواضح أنه اذا كان $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ فـان :

$$C^{-1} = [\hat{A}\hat{B}]^{-1} = \hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}$$

وكذلـــــك :

$$(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\ldots)^{-1} = (\ldots\hat{C}^{-1}\hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1})$$

17 - تعاريـــــف - II :

آ - لتكن Ψ مجموعة توابع الاحداثيـــــات (x,y,z) المستمرة والقابلة للاشتقاق في جميع نقط الفراغ والمعينة فـــي المجال

$$(x,y,z) \in (-\infty,+\infty)$$

وعندئذ يتعين أي موءثر خطي بمعرفة طريقة تأثيره على مجموعة التوابع $\psi(x,y,z)$ ؛ فالموءثرات $\hat{p},\hat{d},\hat{q}$ تتعين على الترتيب ، بالعلاقات التالية :

$$\hat{q}\,\psi(x,y,z) = x\,\psi(x,y,z)\ ,\ \hat{d}\,\psi(x,y,z) = \frac{\partial}{\partial y}\,\psi(x,y,z)$$

$$\hat{p}\,\psi(x,y,z) = \psi(-x,-y,-z) \tag{3.14}$$

وقد يتعين الموءثر أحياناً بشكل تكاملي كما يتضح من العلاقة :

$$\hat{A}\,\psi(x) = \int A(x,\xi)\,\psi(\xi)\,d\xi \tag{3.15}$$

يسمى المقدار $A(x,\xi)$ نواة الموءثر $\hat{A}$. ان نواة موءثر الواحدة هو تابع ديراك ، وعلى هذا الأساس نعرف هذا التابع الذي نرمز له بالرمز δ بالشكل :

$$I\,\psi(x) = \int \delta(x-\xi)\,\psi(\xi)\,d\xi \tag{3.16}$$

ويمكن بواسطة التابع δ وضع كثير من الموءثرات بشكل تكاملي ،فمثلاً نضع الموءثر $\hat{q}$ الوارد في (3.14) كما يلي:

$$\hat{q}\,\psi = \int Q(x,\xi)\,\psi(\xi)\,d\xi = \int \xi\,\delta(x-\xi)\,\psi(\xi)\,d\xi \tag{3.17}$$

وفي الحالة الخاصة عندما يأخذ المتحول x قيما متقطعة نرمز لها بالرمز x_n وللتابع المقابل بـ $\psi(x_n)$ بحيث يكون :

$$\psi(x_n) \equiv \psi_n \equiv \psi(n) \tag{3.18}$$

في هذه الحالة يتحول التكامل (3.15) الى مجموع من الشكل :

$$\sum_n A_{mn}\,\psi_n = \psi_m \tag{3.19}$$

حيث A_{mn} هي مصفوفة تمثل دور النواة في (3.15) . ويبدو أن

(3.19) شبيهة بجداء المصفوفات حيث نعتبر أن كلاً من التابعين φ_m و ψ_n هو مصفوفة ذات عمود واحد وأن كل عنصر من عناصرهما هو مركبة متجه في فراغ اقليدي E_n ، مع العلم أن التابع ψ_n يتحول الى φ_m بواسطة المصفوفة ، الموءثر A_{mn} . ومن الواضح أن عناصر مصفوفة الواحدة هي رمز كرونيكر δ_{mn} . أما عناصر مصفوفة الموءثر $\hat{C}$ الذي هو عبارة عن جداء الموءثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ فهي:

$$C_{mn} = \sum_k A_{mk} B_{kn} \qquad (3.20)$$

ب ـ يعرف الجداء السلمي للتابعين $f(x)$ و $g(x)$ بالعلاقة :

$$(f, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)\, g(x)\, dx \qquad (3.21)$$

(حيث ترمز x لكافة المتحولات). ويقال عن التابعين f و g انهما متعامدان عندما ينعدم جداؤهما العددي ، ومن الواضح أن الجداء العددي قد يتباعد ولكننا سنقتصر على ما يسمى مجموعة التوابع التربيعية المكاملة والتي نرمز لها بالرمز $L^2(+\infty,-\infty)$ ، والتي يتقارب من أجلهما التكامل (3.21) أي أن :

$$\int f^* g\, dx < \infty \qquad (3.22)$$

ان خواص الجداء العددي تنتج مباشرة من (3.21) ؛ فمن السهل التحقق من صحة العلاقات التالية :

$$\begin{aligned}
(f+f', g) &= (f, g) + (f', g) \\
(f, g+g') &= (f, g) + (f, g') \qquad (3.23)\\
(f, \alpha g) &= \alpha (f, g) \\
(\alpha f, g) &= \alpha^* (f, g)
\end{aligned} \quad \Bigg\} \ \forall \alpha \in \mathbb{C}$$

جـ ـ يعرف نظيم التابع f (ويرمز له بالرمز $\|f\|$) بالعلاقة :

$$\|f\| = \sqrt{(f, f)} = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} f^* f\, dx \right]^{1/2} \qquad (3.24)$$

لنعرف الآن فراغ هيلبرت فنقول انه فراغ مجموعة التوابع $L^2(-\infty, +\infty)$ التي عرف عليها الجداء العددي (3.21) والنظيم (3.24)، ونقول عن هذه التوابع أنها متجهات في فراغ هيلبرت.

د ـ يعرّف الجداء العددي (الداخلي) للتابعين ψ و φ ذوي المتحولات المتقطعة بالعلاقة:

$$(\psi, \varphi) = \sum_n \psi_n^* \varphi_n \equiv \langle \psi | \varphi \rangle \qquad (3.25a)$$

وهو عبارة عن جداء متجه سطر $\langle \psi |$ مركباته $(\psi_1^*, \psi_2^*, \ldots, \psi_n^*)$ بمتجه عمود $| \varphi \rangle$ مركباته $(\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_n)$، ومن الواضح أن عدد مركبات متجه السطر يجب أن يساوي عدد مركبات متجه العمود ويكون لدينا:

$$\langle \psi | \varphi \rangle = (\psi_1^* \psi_2^* \ldots \psi_n^*) \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix} = \psi_1^* \varphi_1 + \psi_2^* \varphi_2 + \cdots + \psi_n^* \varphi_n \qquad (3.25b)$$

هـ ـ يعرف عنصر مصفوفة المؤثر $\hat{A}$ بالعلاقة:

$$A_{mn} \equiv \langle \varphi_m | \hat{A} | \varphi_n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_m^* \hat{A} \varphi_n \, dx \qquad (3.26)$$

18 ـ المؤثرات الهرميتية :

آ ـ يعرف المؤثر المرافق ذاتياً $\hat{L}^+$ لمؤثر $\hat{L}$ بالعلاقة:

$$\langle \psi | \hat{L} | \varphi \rangle = (\langle \varphi | \hat{L}^+ | \psi \rangle)^* \qquad (3.27a)$$

التي توضع أيضاً بالشكل:

$$\int \psi^* \hat{L} \varphi \, dx = \int \varphi (\hat{L}^+ \psi)^* \, dx \qquad (3.27b)$$

لنبرهن أن $(\hat{L}^+)^+ = \hat{L}$ ولهذا نبدأ من التعريف (3.27a) ونأخذ المرافق الزائدي من الطرف الأيمن حيث نجد:

$$\langle \psi | \hat{L} | \varphi \rangle = (\langle \varphi | \hat{L}^+ | \psi \rangle)^* = (\langle \psi | (\hat{L}^+)^+ | \varphi \rangle)^{**} = \langle \psi | \hat{L}^{++} | \varphi \rangle$$

$$\hat{L}^{++} = \hat{L}$$

ومنـــه :

(3.28)

ومن السهل حساب $(\alpha\hat{L})^{+}$ كما يلي :

$$\langle \psi | \alpha \hat{L} | \varphi \rangle = (\alpha \langle \varphi | \hat{L}^{+} | \psi \rangle)^{*} = \alpha^{*} (\langle \varphi | \hat{L}^{+} | \psi \rangle)^{*}$$

ومنــه :

$$(\alpha \hat{L})^{+} = \alpha^{*} \hat{L}^{+} \quad ; (\forall \alpha \in \mathbb{C})$$

(3.29)

لنحسب مرافق الموءثر $\hat{C}$ الذي يساوي جداء موءثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ فنجـــد طبقاً للتعريف (3.27) :

$$\langle \psi | \hat{A}\hat{B} | \varphi \rangle = (\langle \varphi | (\hat{A}\hat{B})^{+} | \psi \rangle)^{*}$$

ومن جهة أخرى لدينـــا :

$$\langle \psi | \hat{A}\hat{B} | \varphi \rangle = (\langle \hat{B}\varphi | \hat{A}^{+} | \psi \rangle)^{*} = \langle \hat{A}^{+}\psi | \hat{B} | \varphi \rangle = (\langle \varphi | \hat{B}^{+}\hat{A}^{+} | \psi \rangle)^{*}$$

ومنه بالمقارنة بين العلاقتين السابقتين نجد : $(\hat{A}\hat{B})^{+} = \hat{B}^{+}\hat{A}^{+}$

ويمكن تعميم ذلك على عدة موءثرات حيث نجـد :

(3.30)

$$(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\dots)^{+} = (\dots \hat{C}^{+}\hat{B}^{+}\hat{A}^{+})$$

ب - يعرف الموءثـر الهرميتي بأنه الموءثر الذي يتطابق مـع مرافقه الذاتي وهو حالة خاصة من المرافق الذاتي المعرف بالعلاقـــة (3.27) أي أن :

(3.31)

$$\langle \psi | \hat{A} | \varphi \rangle = (\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle)^{*}$$

لنأخذ، مثلاً ، الموءثر $\hat{x}$ ولنختبر هرميتية هذا الموءثر ولهـــذا نفرض φ و ψ تابعين للاحداثيات فقط وعندئذ نجد طبقاً لِـ(3.27):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{*} \hat{x} \varphi \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi (\hat{x}\psi)^{*} dx \Rightarrow \langle \psi | \hat{x} | \varphi \rangle = (\langle \varphi | \hat{x} | \psi \rangle)^{*}$$

فالموءثر $\hat{x}$ هو موءثر هرميتي . أما الموءثر d/dx فهو غير هرميتي

لأن :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{d}{dx} \psi \, dx = \psi^* \psi \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi \frac{d\psi^*}{dx} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi \left(-\frac{d}{dx}\psi\right)^* dx$$

أي أن :

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^+ = -\frac{d}{dx} \neq \frac{d}{dx} \qquad (3.32)$$

ولاختبار هرميتية الموءثر $\frac{d^n}{dx^n}$ نفرض أولا أن التوابع ψ و φ ، التي هي متجهات في فر غ هيلبرت المعرف سابقاً ، مستمرة وقابلة للاشتقاق بقدر ما نريد من المرات وتحقق العلاقة $\psi^{(n)}(\infty) = \varphi^{(n)}(\infty) = 0 ; (\forall n \in Z)$ وعندئذ يكون :

$$\int \psi^* \frac{d^n}{dx^n} \varphi \, dx = (-1)^n \int \varphi \frac{d^n \psi^*}{dx^n} dx = \int \varphi \left[(-1)^n \frac{d^n}{dx^n} \psi\right]^* dx$$

ومنه نجـــد :

$$\left(\frac{d^n}{dx^n}\right)^+ = (-1)^n \frac{d^n}{dx^n} \qquad (3.33)$$

وبالتالي لايكون الموءثر (d^n/dx^n) هرميتياً الا عندما يكون n زوجيا .

لنبحث أخيراً عن شرط هرميتية الموءثر الممثل بمصفوفة ولهذا نجد طبقاً لِ (3.27) بعد وضع الطرفين بشكل مصفوفات :

$$\langle \psi | \hat{A} | \varphi \rangle = \sum_{m,n} \psi_m^* A_{mn} \varphi_n \, , \quad (\langle \varphi | \hat{A}^+ | \psi \rangle)^* = \sum_{m,n} \varphi_m A_{mn}^{+*} \psi_n^*$$

وبتغيير مكان الدليلين في المجموع الأخير يكون :

$$\sum_{m,n} \varphi_m A_{mn}^{+*} \psi_n^* = \sum_{m,n} \psi_m^* (A_{nm}^+)^* \varphi_n$$

أي أن :

$$\sum_{m,n} \psi_m^* A_{mn} \varphi_n = \sum_{m,n} \psi_m^* (A_{nm}^+)^* \varphi_n \qquad (3.34)$$

ومنه نستنتج :

$$A^{+}_{nm} = A^{*}_{mn} \Rightarrow A_{mn} = (A^{+}_{nm})^{*}$$

(3.35)

جـ ـ ليكن الموءثر $\hat{A}$ الذي يوءثر على التابع Ψ ($\|\Psi\| \neq 0$)

بحيث تحقق المعادلة :

$$\hat{A}\Psi = \lambda \Psi$$

(3.36a)

نسمي λ القيمة الخاصة للموءثر $\hat{A}$ عند تاثيره على التابع Ψ الذي يسمى التابع الخاص للموءثر $\hat{A}$. واذا وجد للموءثر $\hat{A}$ عند تاثيره على التابع Ψ قيمة خاصة واحدة λ_n يقابلها تابع خاص نرمز له Ψ_n فاننا نضع المعادلة السابقة بالشكل:

$$\hat{A}\Psi_n = \lambda_n \Psi_n$$

(3.36b)

توءلف مجموعة القيمة الخاصة λ_n طيف الموءثر $\hat{A}$ ويقال عن الطيف في هذه الحالة أنه غير منطبق (Nondegenerate) . أما اذا قابلت القيمة الخاصة λ_n عددا من التوابع $\Psi_{n_i} : (i = 1, 2, \ldots, S)$ فان طيف الموءثر $\hat{A}$ يكون منطبقاً (Degenerate)(أو متوالدا) . نسمي S عندئذ رتبة الانطباق ، وتوضع المعادلة (3.36b) عندئذ بالشكل :

(3.36c)

$$\hat{A}\Psi_{n_i} = \lambda_n \Psi_{n_i} \quad : (i = 1, 2, \ldots, S)$$

19 ـ خواص الموءثرات الهرميتية :

آ ـ نظراً لأهمية الموءثرات الهرميتية في ميكانيك الكم فاننا سنذكر أهم النظريات المتعلقة بها .

1 ـ اذا كان لموءثرين هرميتيين نفس التوابع الخاصة فانهما يتبادلان .

في الحقيقة اذا فرضنا أن Ψ_n هو تابع خاص مشترك للموءثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ على الترتيب فاننا نجد :

$$\hat{A}\hat{B}\Psi_n = \hat{A}\, b\Psi_n = b\hat{A}\Psi_n = ba\Psi_n = \hat{B}\hat{A}\Psi_n$$

أي أن $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ وبالتالي $[\hat{A},\hat{B}] = 0$.

ونحصل على نتيجة مشابهة اذا أخذنا التابع $f(x)$ المؤلف من تركيب خطي من التوابع $\psi_n(x)$ حيث نجد :

$$\hat{A}\hat{B} f(x) = \sum_k \hat{A}\hat{B} c_k \psi_k(x) = \sum_k a\, b\, c_k \psi_k(x) = \hat{B}\hat{A} f(x)$$

أي أن :

$$\hat{A}\hat{B} f(x) = \hat{B}\hat{A} f(x) \Rightarrow [\hat{A},\hat{B}] = 0 \qquad (3.37)$$

2 ـ اذا تبادل موءثران هرميتيان فانه يمكن وضع عناصرهما المصفوفية في آن واحد بشكل قطري .

في الحقيقة اذا فرضنا أن العناصر المصفوفية للموءثر $\hat{A}$ قطرية أي أن:

$$A_{mn} = \lambda_m \delta_{mn} \qquad (3.38)$$

وكذلك نجد بسبب التبادل : $(AB)_{mn} = (BA)_{mn}$ أو :

$$\sum_k A_{mk} B_{kn} = \sum_k B_{mk} A_{kn} = \sum_k A_{kn} B_{mk}$$

وطبقاً لـِ (3.38) يكون : $\sum_k \lambda_m \delta_{mk} B_{kn} = \sum_k \lambda_k \delta_{kn} B_{mk}$

ومن الواضح أن كلا المجموعتين في العلاقة السابقة يحوي حداً واحداً هو عندما $k = m$ في الطرف الأول و $k = n$ في الطرف الثاني وعليه يكون : $\lambda_m B_{mn} - \lambda_n B_{mn} = 0 \Rightarrow B_{mn}(\lambda_m - \lambda_n) = 0$ ، فاذا كان $m \neq n$ فان $B_{mn} = 0$ وبالتالي تنعدم جميع العناصر اللاقطرية أما اذا كان $m = n$ فان : $B_{mn} = B_{mm} = B_{nn} \neq 0$ ، وهكذا تكون عناصر المصفوفة $\hat{B}$ قطرية أيضاً .

3 ـ ان القيم الخاصة للموءثرات الهرميتية هي قيم حقيقية .

ليكن الموءثر الهرميتي $\hat{L}$ ذي القيمة الخاصة λ والتابع الخاص ψ_n وعليه يكون : $\hat{L}\psi_n = \lambda \psi_n$ ، وبالاستفادة من هرميتية الموءثر نكتب :

$$\langle \psi_n | \hat{L} | \psi_n \rangle = \lambda \langle \psi_n | \psi_n \rangle = (\langle \psi_n | \hat{L} | \psi_n \rangle)^* = \lambda^* \langle \psi_n | \psi_n \rangle$$

ومنه :

$$\lambda = \lambda^*$$

(3.39)

4 - يكون التابعان الخاصان المقابلان لقيمتين خاصتين مختلفتين لمؤثر هرميتي ، متعامدين .

$$\hat{L}\Psi_n = \lambda_n \Psi_n \quad , \quad \hat{L}\Psi_m = \lambda_m \Psi_m$$

لدينا حسب الفرض : $\langle \Psi_m | \hat{L} | \Psi_n \rangle = (\langle \Psi_n | \hat{L} | \Psi_m \rangle)^* = \lambda_m \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle$ ، ومنه وكذلك نجد : $= \lambda_n \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle$

$$(\lambda_m - \lambda_n) \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = 0 \qquad (3.40)$$

وبما أن $m \neq n$ ($\lambda_m \neq \lambda_n$) فرضا فلا بد أن يكون :

$$\langle \Psi_m | \Psi_n \rangle \equiv \langle m | n \rangle = 0 \qquad (3.41)$$

ونقول عندئذ عن التابعين Ψ_m و Ψ_n أنهما متعامدان .

واذا فرضنا $m = n$ فان العلاقة (3.40) تتحقق عندما يساوي الجداء العددي $\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle$ مقداراً محدوداً يمكن أن يختار بحيث يساوي الواحد أي أن :

$$\langle \Psi_m | \Psi_m \rangle = \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle \equiv \langle n | n \rangle = 1 \qquad (3.42)$$

ويمكن توحيد (3.41) و (3.42) بعلاقة واحدة هي :

$$\langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{if } m = n \\ 0 & \text{if } m \neq n \end{cases} \qquad (3.43)$$

وهي العلاقة التي يجب أن تحققها التوابع الموجية الخاصة التي اعتبرناها متجهات في فراغ هيلبرت ، وهي بهذه الخاصة تشبه متجهات الواحدة في الفراغ الاقليدي التي تحقق العلاقة :

$$\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } i = j \\ 0 & \text{if } i \neq j \end{cases} \qquad (3.44)$$

ومن المعلوم أنه يمكن نشر أي متجه من الفراغ الاقليدي بواسطة متجهات الواحدة $\vec{e}_i$ ، وتعميما لذلك يمكن نشر أي متجه (تابع ما) في فراغ هليبرت بواسطة المتجهات Ψ_n التي تحقق العلاقة (3.43) ، ونقول أن هذه المتجهات تحقق شرط التوامد*.

ب ـ هل تحقق التوابع Ψ_{n_i} في (3.36C) شرط التوامد السابق ؟

في الحقيقة ليس من الضروري أن يتحقق الشرط (3.43) عندما يكون الطيف منطبقاً ولكن من الممكن دوماً ايجاد مجموعة توابع φ_j متعامدة انطلاقاً من التوابع Ψ_{n_i} (أو Ψ_i اختصاراً) كما يلي :

نأخذ أولاً φ_1 و φ_2 طبقاً للعلاقتين :

$$\varphi_1 = \Psi_1 \quad , \quad \varphi_2 = \Psi_1 + \alpha_{22}\, \Psi_2 \qquad (3.45a)$$

حيث α_{22} هو عدد يتم اختياره بحيث يتعامد Ψ_1 و φ_2 أي طبقاً للعلاقة :

$$\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = 0 \Rightarrow \langle \Psi_1 | \Psi_1 \rangle + \alpha_{22} \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = 0$$

ومنه نحسب α_{22} حيث نجد :

$$\alpha_{22} = \frac{\| \Psi_1 \|}{\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle}$$

ثم نأخذ φ_3 طبقاً للعلاقة :

$$\varphi_3 = \Psi_1 + \alpha_{32}\, \Psi_2 + \alpha_{33}\, \Psi_3 \qquad (3.45b)$$

ونختار العددين α_{32} و α_{33} بحيث يتعامد φ_3 مع كل من φ_1 و φ_2 فنحصل على معادلتين نحسب منهما α_{33} و α_{32} ... وهكذا .

ج ـ لقد رأينا أن التوابع الخاصة للمؤثرات الهرميتية تؤلف قاعدة تامة يمكن نشر أي تابع بها ، ولكن الأمر يختلف قليلا عندما يكون طيف المؤثر مستمراً ويكون التابع الخاص له من النوع $\Psi(\lambda, x)$.

*) لقد تم نحت هذه الكلمة من كلمتي توحيد (الجداء العددي يساوي الواحد) وتعامد (الجداء العددي يساوي الصفر) وهي تقابل كلمة (Orthonormalization) بالانكليزية المنحوتة من كلمتين (Normalization . Orthogonal).

لما مشابهة علاقات تتحقق بحيث التوابع هذه اختيار يمكن أنه الا شرط التوامد ψ_n التوابع تحقق عندما المتقطع الطيف في الحال هو : بالشكل تابع أي نشر ويمكن

$$f(x) = \sum_n a_n \psi_n(x)$$

(3.46)

حيث نحسب عوامل النشر بضرب الطرفين بـ $\psi_n^*(x)$ والاستكمال في كافة نقط الفراغ وعندئذ نجد :

$$a_n = \int \psi_n^*(x) f(x) dx \qquad (3.47)$$

أما اذا كان الطيف مستمراً فاننا نعرف التابع $a(\lambda)$ بالعلاقة :

$$a(\lambda) = \int f(x) \psi^*(\lambda, x) dx \qquad (3.48)$$

بفرض $f(x)$ ينتمي الى مجموعة التوابع $L^2(+\infty, -\infty)$ المذكورة سابقاً بحيث يكون :

$$f(x) = \int a(\lambda) \psi(\lambda, x) d\lambda \qquad (3.49)$$

مع العلم أن التكامل بـ λ يشمل الطيف المستمر كله، واذا بدلنا $a(\lambda)$ بقيمتها من (3.48) في (3.49) فاننا نجد :

$$f(x) = \int \psi(\lambda, x) d\lambda \int f(\eta) \psi^*(\lambda, \eta) d\eta =$$

$$= \int f(\eta) d\eta \int \psi^*(\lambda, \eta) \psi(\lambda, x) d\lambda$$

وطبقاً لتعريف تابع ديراك يكون :

$$\int \psi^*(\lambda, \eta) \psi(\lambda, x) d\lambda = \delta(x - \eta) \qquad (3.50)$$

وبالطريقة نفسها نجد اذا بدلنا $f(x)$ بقيمتها في (3.49) في (3.48)، أن :

$$a(\lambda) = \iint a(\mu)\, \Psi(\mu, x)\, \Psi^*(\lambda, x)\, d\mu\, dx$$

أي أن :

$$\int \Psi^*(\lambda, q)\, \Psi(\mu, q)\, dq = \delta(\mu - \lambda) \qquad (3.51)$$

وهكذا تقابل العلاقتان (3.48) و (3.49) العلاقتين (3.46) و (3.47) في الطيف المتقطع . أما العلاقتان (3.50) و (3.51) فيمكن استخدامهما لحساب ثابت النظم في الطيف المستمر.

20 ـ المؤثرات الواحدية ، التحويلات الواحدية :

آ ـ يعرف المؤثر الواحدي $\hat{U}$ بأنه المؤثر الذي يتطابق مرافقه الذاتي مع المؤثر المعاكس لـ $\hat{U}$ أي أن :

$$\hat{U}\hat{U}^+ = \hat{U}^+\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{-1}\hat{U} = \hat{I} \qquad (3.52)$$

ولهذا النوع من المؤثرات أهمية خاصة في ميكانيك الكم ولهذا سنورد أهم خواصها فيما يلي:

1 ـ ان طويلة القيمة الخاصة لمؤثر واحدي تساوي الواحد .

لتكن معادلة القيم الخاصة :

$$\hat{U}\Psi = \lambda\Psi$$

ولنحسب المقدار $\langle \Psi | \hat{U}\hat{U}^+ | \Psi \rangle$ فنجد:

$$\langle \Psi | \hat{U}^+\hat{U} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{I} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1$$

ومن جهة ثانية لدينا :

$$\langle \Psi | \hat{U}^+\hat{U} | \Psi \rangle = \lambda \langle \Psi | \hat{U}^+ | \Psi \rangle = \lambda \left(\langle \Psi | \hat{U}^{++} | \Psi \rangle \right)^* =$$

$$= \lambda \left(\langle \Psi | \hat{U} | \Psi \rangle \right)^* = \lambda\lambda^* \langle \Psi | \Psi \rangle = 1$$

ومن العلاقتين السابقتين نستنتج :

$$|\lambda^2| = 1 \Rightarrow |\lambda| = 1 \qquad (3.53)$$

.2 - جداء موءثرين واحديين هو موءثر واحدي أيضا .

ليكن $\hat{A}$ و $\hat{B}$ موءثرين واحديين ، ان جداءهما $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ و $\hat{C}^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$ ويكون :

$$\hat{C}^+\hat{C} = \hat{B}^+\hat{A}^+\hat{A}\hat{B} = \hat{B}^+\hat{B} = \hat{I}\ ,\ \hat{C}\hat{C}^+ = \hat{A}\hat{B}\hat{B}^+\hat{A}^+ = \hat{A}\hat{A}^+ = \hat{I} \qquad (3.54)$$

ب - يعرف التحويل الواحدي للتابع ψ بانه التحويل الذي يحول التابع ψ الى آخر φ بحيث يكون : $\varphi = \hat{U}^+\psi$ ويحول الموءثر $\hat{A}$ الى موءثر آخر $\hat{a}$ طبقاً للعلاقة $\hat{a} = \hat{U}^+\hat{A}\hat{U}$ ، لنبرهن أن التحويل الواحدي يحقق الخواص التالية :

1 - يحافظ على العلاقات التبادلية : ليكن لدينا المبدل $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{C}$ ولنجرِ تحويلاً واحدياً عليه فنجد :

$$\hat{U}^+[\hat{A},\hat{B}]\hat{U} = \hat{U}^+\hat{A}\hat{B}\hat{U} - \hat{U}^+\hat{B}\hat{A}\hat{U} = \hat{U}^+\hat{A}\hat{U}\hat{U}^+\hat{B}\hat{U} - \hat{U}^+\hat{B}\hat{U}\hat{U}^+\hat{A}\hat{U} = \hat{U}^+\hat{C}\hat{U}$$

ومنه :

$$\hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a} = [\hat{a},\hat{b}] = \hat{c} \qquad (3.55)$$

2 - يحافظ على هرميتية الموءثرات : في الحقيقة اذا كان لدينا $\hat{A} = \hat{A}^+$ وأجرينا التحويل الواحدي التالي:

$$\hat{U}^+\hat{A}\hat{U} = \hat{U}^+\hat{A}^+\hat{U} = \hat{a}^+$$

ثم أخذنا المرافق الزائدي للطرفين فاننا نجد :

$$(\hat{U}^+\hat{A}\hat{U})^+ = \hat{U}^+\hat{A}^+\hat{U}^{++} = \hat{U}^+\hat{A}^+\hat{U} = \hat{U}^+\hat{A}\hat{U} \Rightarrow \hat{a}^+ = \hat{a} \qquad (3.56)$$

3 - يحافظ على القيم الخاصة : لتكن λ القيمة الخاصة للموءثر $\hat{A}$ بحيث يكون :

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi$$

ولنجر التحويل الواحدي وذلك بضرب الطرفين بـ $\hat{U}^+$ فنجد :

$$\hat{U}^+ \hat{A} \Psi = \lambda \hat{U}^+ \Psi \Rightarrow \hat{U}^+ \hat{A} \hat{U} \hat{U}^+ \Psi = \lambda \hat{U}^+ \Psi$$

ومنه :

$$\hat{a} \Psi = \lambda \Psi \qquad (3.57)$$

4 - يحافظ على الجداء العددي والعناصر المصفوفية : في الحقيقة يكون لدينا :

$$\langle \Psi_m | \hat{A} | \Psi_n \rangle = \langle \Psi_m | \hat{U} \hat{U}^+ \hat{A} \hat{U} \hat{U}^+ | \Psi_n \rangle = \int \Psi_m^* \hat{U} \hat{a} \Psi_n \, dx =$$

$$= \int \hat{a} \Psi_n (\hat{U}^+ \Psi_m)^* dx = \int \Psi_m \hat{a} \Psi_n \, dx = \langle \Psi_m | \hat{a} | \Psi_n \rangle \qquad (3.58)$$

21 - العلاقة بين طيفي موءثرين :

آ - ليكن الموءثر $\hat{A}$ في الفراغ $L^2(-\infty, +\infty)$ ولنفرض أن توابعه الخاصة توءلف قاعدة تامة يمكن نشر أي تابع $f(x)$ بها كما في (3.46) ثم لنضرب طرفي هذه العلاقة من اليسار بالموءثر $\hat{B}$ فنجد :

$$\hat{B} f(x) = \sum_n a_n \hat{B} \Psi_n(x) \qquad (3.59)$$

ولحساب $\hat{B} \Psi_n(x)$ نضعها بالشكل :

$$\hat{B} \Psi_n(x) = \sum_m B_{mn} \Psi_m(x) \qquad (3.59a)$$

مع العلم أن B_{mn} هو عنصر المصفوفة التالي :

$$B_{mn} = \langle m | \hat{B} | n \rangle = \int \Psi_m^*(x) \hat{B} \Psi_n(x) \, dx \qquad (3.60)$$

ويسهل التأكد من صحة العلاقة $(3.59a)$ اذا بدلنا (3.60) فيها حيث نجد :

$$\sum_m \int \Psi_m^*(x') \hat{B} \Psi_n(x') \, dx' \, \Psi_m(x) = \int \hat{B} \Psi_n(x) \, \delta(x - x') \, dx'$$

وهذا المقدار الأخير يساوي $\hat{B} \Psi_n(x)$، طبقاً لخواص تابع ديراك

بقيمتها $\hat{B}\,\psi_n(x)$ بعد تبديل $\hat{B}\,f(x)$ ويسهل الآن حساب $\delta(x-x')$ في (3.59) حيث نجد :

$$\hat{B} f(x) = \sum_n a_n \sum_m B_{mn}\, \psi_m(x) = \sum_m a'_m\, \psi_m(x)$$

$$a'_m = \sum_n a_n B_{mn}$$

مع العلم أن : فان العلاقة

وبما أن التوابع ψ_m هي التوابع الخاصة للموءثر $\hat{A}$ تسمح لنا بحساب طيف الموءثر $\hat{B}$ بدلالة طيف الموءثر السابقة (3.61) ومن الواضح أنه اذا كانت ψ_m تابعًا خاصًا أيضًا للموءثر $\hat{B}$ و $\hat{A}$. فان المصفوفة B_{mn} تصبح قطرية ذلك لأن :

$$B_{mn} = \int \psi_m^* \; \hat{B}\; \psi_n \; dx = b_n\, \delta_{mn}$$

ب ـ يمكن الحصول على القيم الخاصة لموءثر هرميتي $\hat{C}$ اذا علمت التوابع الخاصة لأي موءثر آخر $\hat{B}$ وذلك كما يلي :

نفرض أن التوابع الخاصة للموءثر $\hat{C}$ هي $g_n(x)$ ثم ننشر هذه التوابع بالتوابع الخاصة لموءثر ما $\hat{B}$ فنجد :

$$g_n(x) = \sum_m A_{nm}\; \psi_m(x)$$

ثم نكتب شرط التوامد التالي للتوابع $g_n(x)$:

$$\int g_n^*(x)\, g_n(x)\; dx = \int \Big[\sum_i A_{in}^*\, \psi_i^*(x)\Big]\Big[\sum_j A_{jn}\, \psi_j(x)\Big]\, dx =$$

$$= \sum_{i,j} A_{in}^*\, A_{jn} \int \psi_i^*(x)\, \psi_j(x)\; dx =$$

$$= \sum_{i,j} A_{in}^*\, A_{jn}\, \delta_{ij} = \sum_i A_{in}^*\, A_{im} = \delta_{mn}$$

وهذا يعني أن المصفوفة A_{nm} هي مصفوفة واحدية أي :

$$\hat{A}\,\hat{A}^+ = \hat{A}^+\,\hat{A} = \hat{I}$$

وهكذا يكون التحويل من التمثيل $\hat{B}$ (حيث توصف الجملة بالتوابع خاصة للموءثر $\hat{B}$) الى التمثيل $\hat{C}$ (حيث توصف الجملة بالتوابع خاصة للموءثر $\hat{C}$) واحديًا، وبما أن هذا النوع من التحويل لايغير من القيم الخاصة فيمكن أن نجد طيف أي موءثر $\hat{B}$ بأن نأخذ مجموعة توابع تامة (مهما كانت هذه التوابع) وتحسب العناصر المصفوفة التالية :

$$B_{mn} = \int \psi_m^*(x)\; \hat{B}\; \psi_n(x)\, dx \;\equiv\; \langle m|\hat{B}|n\rangle$$

ثم نبحث عن مصفوفة $\hat{A}$ بحيث يؤدي التحويل $\hat{A}\hat{B}\hat{A}^+$ الى مصفوفة قطرية، وعندئذ تكون العناصر المصفوفية القطرية b_{nn} هي القيم الخاصة المطلوبة. قد تكون هذه الطريقة طويلة لأن عدد التوابع $\psi_n(x)$ يمكن أن لايكون محدوداً وبالتالي تكون المصفوفات الناتجة غير منتهية، ولهذا نلجأ الى أسلوب آخر لحساب القيم الخاصة.

جـ - يعرف أثر مصفوفة ما، ويرمز له بالرمز Sp بأنه مجموع العناصر القطرية لهذه المصفوفة:

$$Sp(L_{mn}) = \sum_n L_{nn} \qquad (3.62)$$

ويمكن البرهان أن أثر مصفوفة ناتجة عن جداء مصفوفتين لايتغير بتغيير ترتيبهما أي أن:

$$Sp\,AB = \sum_n \sum_k A_{nk} B_{kn} = \sum_k \sum_n B_{kn} A_{nk} = Sp\,BA$$

ويمكن تعميم ذلك على جداء ثلاث مصفوفات A و B و C حيث نجد:

$$Sp(ABC) = Sp(BCA) = Sp(CAB)$$

ويمكن البرهان أيضا أن أثر مصفوفة لايتغير عند اجراء تحويل واحدي عليها

$$Sp\,A = Sp\,\hat{U}^+ A \hat{U} = Sp\,a$$

22 - الفرضيات الأساسية في ميكانيك الكم :

آ - يرتكز ميكانيك الكم على عدة فرضيات أساسية هي :

1 - يقابل كل قيمة فيزيائية كلاسيكية موءثر خطي هرميتي في ميكانيك الكم.

2 - يقابل كل حالة فيزيائية للجملة تابع موجي منظم ψ.

3 - لايمكن لأي مقدار فيزيائي أن يأخذ سوى القيم الخاصة للموءثر المقابل له.

4 - يحسب الاحتمال الرياضي لوجود مقدار فيزيائي L في الحالة الموصوفة بالتابع ψ بالعلاقة:

$$\langle L \rangle \equiv \bar{L} = \langle \psi | L | \psi \rangle = \int \psi^* L \psi \, dx \qquad (3.63a)$$

وفي الحالة الخاصة عندما يكون ψ_n تابعاً خاصاً للمؤثر $\hat{L}$ بقيمة خاصة λ فان الاحتمال :

$$\langle \hat{L} \rangle = \int \psi_n^* \lambda \psi_n \, dx = \lambda_n$$

(3.63 b)

ويمكن تعميم ذلك لأي مؤثر $\hat{L}^k$ حيث نجد :

$$\langle \hat{L}^k \rangle = \lambda^k$$

(3.63 c)

واذا نشرنا التابع ψ بالتوابع الخاصة ψ_n للمؤثر الهرميتي $\hat{L}$ بالشكل $\sum_n c_n \psi_n$ وحسبنا القيمة المتوقعة (الاحتمال السابق) فاننا نجد :

$$\langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle = \int \sum_{n,n'} C_{n'}^* \psi_{n'}^* \hat{L} \, c_n \psi_n \, dx = \sum_n |c_n|^2 \lambda_n \quad (3.63 d)$$

5 – تحقق العناصر المصفوفية لمركبات مؤثر الاحداثيات $\hat{x}_i$ والاندفاعات $\hat{p}_i$ معادلتي هاملتون التاليتين :

$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle f | \hat{p}_i | g \rangle &= - \langle f | \frac{\partial \hat{H}}{\partial x_i} | g \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle f | \hat{x}_i | g \rangle &= \langle f | \frac{\partial \hat{H}}{\partial p_i} | g \rangle \end{aligned} \right\} \quad (3.64)$$

حيث $\hat{H}$ مؤثر هاملتون المقابل لتابع هاملتون في الميكانيك الكلاسيكي .

6 – تحقق المؤثرات $\hat{x}_i$ ، $\hat{p}_i$ العلاقات التبادلية التالية :

$$\left. \begin{aligned} [\hat{p}_i , \hat{x}_k] &= -i\hbar \, \delta_{ik} \\ [\hat{p}_i , \hat{p}_k] &= [\hat{x}_i , \hat{x}_k] = 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.65)$$

حيث :

$$(i,k = 1,2,3 \Leftrightarrow x, y, z) , \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054 \times 10^{-27} \text{ erg.sec}$$

هذا ومن الواضح أنه يمكن التعبير عن أي مقدار فيزيائي بدلالة p_i ، x_i وبالتالي يتحول الى موءثر $\hat{L}(p_i, x_i)$ ؛ فالطاقة الحركية $T(p)$ تصبح موءثرا $\hat{p}^2/2m$ والكمون $V(x)$ يصبح موءثرا $\hat{V}(x)$. أما اذا كان مقدار فيزيائي كلاسيكي عبر عنه بدلالة الجداء $p_i x_i$ بالشكل $\sum p_i x_i$ فانه يصبح موءثراً هو :

$$W(x_i, p_i) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3} (\hat{p}_i \hat{x}_i + \hat{x}_i \hat{p}_i) \tag{3.66}$$

والجدير بالذكر أن الزمن لايعتبر موءثراً في ميكانيك الكم وانما مجرد وسيط .

ب - يعرف مشتق موءثر تابع لـ $\hat{L}$ أي $f(\hat{L})$ بالنسبة لـ $\hat{L}$ كما في الفيزياء الكلاسيكية بالعلاقة :

$$\frac{\partial f(\hat{L})}{\partial \hat{L}} = \lim_{\Delta L \to 0} \frac{f(\hat{L} + \Delta \hat{L}) - f(\hat{L})}{\Delta L} \tag{3.67}$$

لنبرهن أن الموءثر $\hat{p}_i \hat{x}_k - \hat{x}_k \hat{p}_i$ يساوي مقداراً ثابتاً في ميكانيك الكم ولهذا نشتق بالنسبة الى كل من $\hat{x}_k$ و $\hat{p}_i$ على الترتيب فنجد :

$$\frac{d}{dx_k}[\hat{p}_i \hat{x}_k - \hat{x}_k \hat{p}_i] = \hat{p}_i \hat{I} - \hat{I} \hat{p}_i = 0$$

$$\frac{d}{dp_i}[\hat{p}_i \hat{x}_k - \hat{x}_k \hat{p}_i] = \hat{I} \hat{x}_k - \hat{x}_k \hat{I} = 0$$

وبما أن مشتق المقدار بين القوسين يساوي الصفر دوماً فلا بد أنه يساوي مقداراً ثابتاً أي أن :

$$\hat{p}_i \hat{x}_k - \hat{x}_k \hat{p}_i = Const.$$

وهذا الثابت هو بالضبط ما ذكرناه في (3.65) .

3ج - حساب الموءثرين $\hat{p}_i$ و $\hat{x}_i$ بدلالة بعضهما :

لنحسب أولاً المبدل $[\hat{p}_i, \hat{x}_i^2]$ ولهذا نكتب :

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_i^2] = \hat{p}_i \hat{x}_i^2 - \hat{x}_i^2 \hat{p}_i = \hat{p}_i \hat{x}_i \hat{x}_i - \hat{x}_i \hat{p}_i \hat{x}_i + \hat{x}_i \hat{p}_i \hat{x}_i - \hat{x}_i \hat{x}_i p_i = -i\hbar 2\hat{x}_i$$

أي أن :

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_i^2] = -i\hbar \frac{\partial \hat{x}_i^2}{\partial \hat{x}_i} \qquad (3.68a)$$

وبالطريقة نفسها نبرهن كتعميم (3.68a) :

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_i^n] = -i\hbar \frac{\partial \hat{x}_i^n}{\partial \hat{x}_i} \qquad (3.68b)$$

وبما أنه يمكن نشر أي تابع $\psi(x)$ ، فيمكننا أن نكتب ، كتعميم لـ (3.68b) :

$$[\hat{p}_i, \psi(\hat{x})] = \hat{p}_i \psi(\hat{x}) - \psi(\hat{x}) \hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x_i} \qquad (3.68c)$$

ولكي نوجد الشكل الصريح للموءثر $\hat{p}_i$ بدلالة $\hat{x}_i$ نحسب تأثيره على تابع ما للاحداثيات ولهذا نأخذ التابع المساعد $\varphi(x_1, x_2, x_3) = 1$ ونوءثر عليه بالموءثر $\hat{p}_i$ فنجد تابعا آخر $f(x_1, x_2, x_3)$ طبقاً للعلاقة :

$$\hat{p}_i \varphi(x_1, x_2, x_3) = f_i(x_1, x_2, x_3) \qquad (3.69)$$

ثم نضرب طرفي العلاقة (3.68c) من اليمين بالتابع $\varphi(x_1, x_2, x_3) = 1$ فنجد:

$$\hat{p}_i \psi(x) \varphi(x_1, x_2, x_3) - \psi(x) \hat{p}_i \varphi(x_1, x_2, x_3) = -i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x_i} \varphi(x_1, x_2, x_3)$$

أو بالشكل :

$$\hat{p}_i \psi(x) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + \psi(x) f_i$$

ومن أجل $i=1$ يكون :

$$\hat{p}_1 \psi(x) = -i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x_1} + \psi(x) f_1 \qquad (3.70)$$

وهكذا نحصل على علاقتين مشابهتين عندما $i=2$ ، $i=3$. وهذا يعني أن تأثير $\hat{p}_i$ على أي تابع يكافىء ضربه من اليسار بـ $-i\hbar (\partial/\partial x_i)$ ثم اضافة المقدار $f_i \psi$. وبناء عليه نحسب $\hat{p}_1 \hat{p}_2 \psi$ كما يلي :

$$\hat{P}_1 \hat{P}_2 \psi = \hat{P}_1 \left(-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + f_2 \psi\right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1}\left(-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + f_2 \psi\right) + f_1 \left(-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + f_2 \psi\right) =$$

$$= (-i\hbar)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1 \partial x_2} - i\hbar \left(\psi \frac{\partial f_2}{\partial x_1} + f_2 \frac{\partial \psi}{\partial x_1}\right) - i\hbar f_1 \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + f_1 f_2 \psi \quad (3.71a)$$

بالطريقة نفسهـــا نجد :

$$\hat{P}_2 \hat{P}_1 \psi = (-i\hbar)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2 \partial x_1} - i\hbar \left(\psi \frac{\partial f_1}{\partial x_2} + f_1 \frac{\partial \psi}{\partial x_2}\right) - i\hbar f_2 \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + f_2 f_1 \psi \quad (3.71b)$$

ومن السهل حساب المبدل $[\hat{P}_1 , \hat{P}_2]$ الآن الذي يساوي الصفر طبقـــاً لِـ (3.65) وبالتـالي يكون :

$$[\hat{P}_1 , \hat{P}_2] \psi = -i\hbar \left(\psi \frac{\partial f_2}{\partial x_1} - \psi \frac{\partial f_1}{\partial x_2}\right) = 0$$

أي أن :

$$\frac{\partial f_2}{\partial x_1} - \frac{\partial f_1}{\partial x_2} = 0 \quad (3.72a)$$

بالطريقة نفسها نستنتج :

$$\frac{\partial f_3}{\partial x_2} - \frac{\partial f_2}{\partial x_3} = 0 \, , \quad \frac{\partial f_1}{\partial x_3} - \frac{\partial f_3}{\partial x_1} = 0 \quad (3.72b)$$

ويمكن اختصار العلاقات الثلاث السابقة بعلاقة واحدة اذا فرضنـــا متجهًا $\vec{f}$ مركباته f_1 ، f_2 ، f_3 وعليه يكون :

$$\overrightarrow{rot}\, f = 0 \quad (3.73)$$

وبالتـالي يجب أن يكون المتجه $\vec{f}$ تدرجًا لكمية سلمية $F(x_1, x_2, x_3)$ أي أن $\vec{f} = \overrightarrow{grad}\, F(x_1, x_2, x_3)$ وبالتـالي فالمركبات f_i تعطى بالعلاقات :

$$f_1 = \frac{\partial F}{\partial x_1} \, , \quad f_2 = \frac{\partial F}{\partial x_2} \, , \quad f_3 = \frac{\partial F}{\partial x_3}$$

وبالتبديل في (3.70) نحصل على عبارة $\hat{P}_i$ التـالية :

$$\hat{P}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial F}{\partial x_i} \quad (3.74)$$

غير أنه يمكن تبسيط هذه العلاقة وحذف الحد الأخير منها باجراء تحويل واحدي عليها بواسطة موءثر واحدي $\hat{U}^+$ لايغير المبدلات ولا هرميتية الموءثرات ولا القيم الخاصة ولا العناصر المصفوفية . ولهذا نأخذ الموءثر $\hat{U}^+$ ونجري التحويل $\hat{U}^+ \hat{P} \hat{U}$. فاذا اخترنا $\hat{U}^+$ بالشكل $\hat{U}^+ = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{F}}$ و $\hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{F}}$ وطبقناه على (3.74) ثم ضربنا الناتج من اليمين بـ $\Psi(x)$ فاننا نجد:

$$\hat{P}_i \Psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{F}} \hat{P}_i e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{F}} \Psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{F}} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial \hat{F}}{\partial x_i} \right) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{F}} \Psi(x) =$$

$$= -i\hbar\, e^{\frac{i}{\hbar}\hat{F}} \left(-\frac{i}{\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{F}} \frac{\partial \hat{F}}{\partial x_i} \Psi(x) - e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{F}} \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} \right) + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{F}} \frac{\partial \hat{F}}{\partial x_i} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{F}} \Psi(x)$$

ومنه نجد بعد الاصلاح : $\hat{P}_i \Psi(x) = -i\hbar\, \partial\Psi/\partial x_i$ أي أن:

$$\hat{P} = -i\hbar \nabla \qquad (3.75)$$

وهي علاقة هامة في ميكانيك الكم نستطيع بواسطتها تحويل أي قيمة كلاسيكية تابعة للاندفاع P الى موءثر .

ولكي نحسب الموءثر $\hat{x}_i$ بدلالة $\hat{P}_i$ نلاحظ مباشرة أن المعادلات الأساسية (3.65) لاتنص صراحة على أن يكون متحول التابع الموجي هو $\hat{x}$ ، اذ يمكن وبالنجاح نفسه ، أن نختار المتحول $\hat{P}$. وهكذا نحصل وبالطريقة السابقة نفسها على عبارة الموءثر $\hat{x}$ في التمثيل الاندفاعي حيث نجد:

$$\hat{x}_i = i\hbar \frac{\partial}{\partial P_i} \quad : (i = 1, 2, 3) \qquad (3.76)$$

24 - حساب التوابع الخاصة للموءثرين $\hat{P}$ و $\hat{x}$:

لنحسب القيم الخاصة والتوابع الخاصة لكل من الموءثرين $\hat{P}_x = -i\hbar(\partial/\partial x)$ في فراغ الاحداثيات x و $\hat{x} = i\hbar(\partial/\partial P)$ في فراغ الاندفاعات P . ان معادلة القيم الخاصة لموءثر الاندفاع من الشكل:

$$\hat{P}_i \Psi = P_i \Psi \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} = P_i \Psi$$

وبالحل نجد :

$$\Psi(x_i) = A\, e^{\frac{i}{\hbar} P_i x_i}$$

ولحساب الثابت A ننظم التابع Ψ بعد ملاحظة أن الطيف مستمر طبقاً لـ (3.50) حيث نجد :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x') \Psi(x)\, dx = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} P(x-x')} dx = \delta(x-x')$$

ومنه :

$$A^2 2\pi\hbar\, \delta(x-x') = \delta(x-x')$$

أو :

$$A^2 = 1/2\pi\hbar \Rightarrow A = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$$

وبالطريقة نفسها نحسب القيم الخاصة للموءثر $\hat{x}$ في فراغ الاندفاع حيث نجد : $i\hbar \frac{\partial}{\partial P} \Psi(P) = x\, \Psi(P)$، ومنه $\Psi(P) = A\, e^{-\frac{i}{\hbar} xP}$،
وحساب الثابت نجد $A = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$، وخلاصة القول اننا نحصل على تابعين متماثلين في كل من الفراغين وهما :

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} Px} , \quad \Psi(P) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} xP} \qquad (3.79)$$

25 ـ تمثيل هايزنبرغ ، تمثيل شرودنغر :

آ ـ نلاحظ أن المعادلة الأساسية (الفرضية الخامسة) تتحقق بأحد شكلين :

1 ـ معادلات هايزنبرغ (*Heisenberg equations*) :

نفرض أن التوابع الموجية لاتتعلق بالزمن أما الموءثرات فتحوي الزمن وعندئذ نجد من (3.64)، بعد اجراء الاشتقاق والانتقال الى الموءثرات واختصار التوابع نجد المعادلتين :

$$\frac{d\hat{P}_i}{dt} = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}_i} , \quad \frac{d\hat{x}_i}{dt} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{P}_i} \qquad (3.78)$$

ومن المبدل (3.68c) نحسب $(\partial \hat{H}/\partial \hat{x}_i)$، ثم وبالطريقة نفسها نحسب $(\partial \hat{H}/\partial \hat{P}_i)$ حيث نجد :

$$-i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}_i} = [\hat{P}, \hat{H}] , \quad +i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{P}_i} = [\hat{x}, \hat{H}] \qquad (3.79)$$

وبالتبديل في (3.78) نحصل على معادلتي هايزنبرغ التاليتين :

$$\frac{d\hat{P}_i}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{P}_i , \hat{H}] \quad , \quad \frac{d\hat{x}_i}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\hat{x}_i , \hat{H}] \tag{3.80}$$

ويبدو بوضوح من هاتين العلاقتين أن شرط استقرار (ثبات) أي قيمة فيزيائية هو أن بتبادل الموءثر المقابل لها مع موءثر هاملتون ،وهذا ما يذكرنا بأقواس بواصون في الميكانيك الكلاسيكي التي تقابل المبدّلات في ميكانيك الكم .

٢ ـ معادلة شرودنغر (Schrödinger equation) :

آ ـ نفرض أن الموءثرات لاتتعلق بالزمن ولكن التوابع الموجية تحوي الزمن وعندئذ اذا بدلنا $\partial\hat{H}/\partial\hat{x}_i$ بقيمتها من (3.79) في (3.64) فاننا نحصل على المعادلة :

$$\frac{d}{dt}\langle f|\hat{P}_i|g\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle f|[\hat{P}_i , \hat{H}]|g\rangle \tag{3.81}$$

وبفك قوى المبدل في الطرف الأيمن واجراء الاشتقاق في الطرف الأيسر بعد ملاحظة أن الزمن موجود فقط في التوابع g و f لافي الموءثرات ، نحصل على المعادلة :

$$\langle \frac{\partial f}{\partial t}|\hat{P}_i|g\rangle + \langle \hat{P}_i f|\frac{\partial g}{\partial t}\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle f|\hat{P}_i\hat{H}|g\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle f|\hat{H}\hat{P}_i|g\rangle \tag{3.82}$$

واذا استفدنا من هرميتية الموءثرات في الطرف الأيمن فاننا نجد أن هذا الطرف يتحول الى الشكل :

$$-\frac{i}{\hbar}\langle f|\hat{P}_i\hat{H}|g\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle f|\hat{H}\hat{P}_i|g\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle \hat{P}_i f|\hat{H}g\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle \hat{H}f|\hat{P}_i g\rangle$$

وبالتعويض في (3.82) ودمج الحدود المتشابهة في الطرفين والانتباه الى تغير اشارة $(i/\hbar)$ باعتبارها دخلت ضمن الجداء السلمي

فاننا نجد أخيراً :

$$\langle \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \hat{H} f | \hat{P}_i g \rangle + \langle \hat{P}_i f | \frac{\partial g}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \hat{H} g \rangle = 0$$

ولكي تتحقق هذه المعادلة مهما كانت كل من f و g يجب أن يكون:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} f \quad , \quad \frac{\partial g}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} g$$

فاذا رمزنا لكل من g و f بالتابع ψ فاننا نحصل على المعادلة الأهم في ميكانيك الكم وهي :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \qquad (3.83)$$

وهي معادلة شرودنغر غير المستقرة (المتعلقة بالزمن) التي استخدمناها في الفصل الثاني والتي استنتجناها هناك بطريقة أقل دقة .

ب ـ ان كلاً من تمثيل شرودنغر وتمثيل هايزنبرغ ينتج من الفرضية الخامسة المعبر عنها بالمعادلات (3.64)، ولهذا يجب أن تتطابق متوسطات القيم الفيزيائية في التمثيلين ، ولكي يتم ذلك يجب أن ينتج أحدهما عن الآخر بتحويل واحدي ، وهذا ماتريد اثباته الآن، حيث سنبرهن أن المؤثر $\hat{S} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ هو المؤثر الواحدي المطلوب .

لنرمز لكل من المؤثر والتابع بـ $\hat{L}$ و f على الترتيب في تمثيل هايزنبرغ يقابلها $\hat{\Lambda}$ و ψ في تمثيل شرودنغر . وبالتالي يجب أن تتحقق العلاقتان التاليتان عند التحويل من تمثيل هايزنبرغ الى تمثيل شرودنغر .

$$\psi = \hat{S}^+ f \quad , \quad \hat{\Lambda} = \hat{S}^+ \hat{L} \hat{S} \qquad (3.84)$$

نشتق الأولى بالنسبة للزمن بعد ملاحظة أن f لايتعلق بالزمن :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial \hat{S}^+}{\partial t} f = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} (\hat{S}^+ f) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \psi$$

وهي معادلة شرودنغر للتابع ψ .

وللحصول على معادلتي هايزنبرغ نشتق المعادلة الثانية من (3.84)

بالنسبة للزمن فنجد (بعد ضرب طرفيها من اليسار ومن اليمين $\hat{S}$ و $\hat{S}^+$ على الترتيب مع العلم أن $\hat{\Lambda}$ لايحوي الزمن) :

$$\frac{\partial \hat{L}}{\partial t} = \frac{\partial \hat{S}}{\partial t}\hat{\Lambda}\hat{S}^+ + \hat{S}\hat{\Lambda}\frac{\partial \hat{S}^+}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{S}\hat{\Lambda}\hat{S}^+ - \frac{i}{\hbar}\hat{S}\hat{\Lambda}\hat{S}^+\hat{H}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}\hat{L} - \hat{L}\hat{H}\right] = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{L}]$$

وهي معادلة هايزنبرغ للموءثر $\hat{L}$.

ج ـ لقد حصلنا في الفصل الثاني على معادلة شرودنغر بطريقة بسيطة، وكان من الضروري ، بعد دراسة الموءثرات البرهان أن هذه المعادلة تنتج من الفرضيات الأساسية وهذا ما فعلناه في هذه الفقرة .

ان جوهر المسألة في ميكانيك الكم يتلخص في حل هذه المعادلة وحساب القيم الخاصة (طيف الطاقة) والتوابع الخاصة Ψ_n والحصول على التابع الموجي Ψ كتركيب خطي لهذه التوابع مع العلم أن مربع التابع Ψ أي $\Psi^*\Psi = |\Psi|^2$ يساوي الكثافة الاحتمالية لوجود الجسيم في الفراغ ، مع أن هذه الكثافة لاتتعلق بالزمن عندما يوصف الجسيم بمعادلة شرودنغر المستقرة التالية :

$$i\hbar\frac{\partial \Psi_n(x,t)}{\partial t} = E_n\Psi_n(x,t) = \hat{H}\Psi_n(x,t) \qquad (3.85)$$

أو بالشكل: $\frac{d\Psi_n}{\Psi_n} = -i\frac{E_n}{\hbar}dt$ ومنه نجد بعد الاستكمال بالزمن:

$$\Psi_n(x,t) = e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}\Psi_n(x) \qquad (3.86)$$

أن الكثافة الاحتمالية لوجود الجسيم في الحالة n وفي النقطة x في الزمن t، فهي ، كما يبدو، مستقلة عن الزمن لأن :

$$|\Psi_n(x,t)|^2 = |\Psi_n(x)|^2$$

ولذلك يقال عن هذه الحالات أنها مستقرة، ويكون متوسط أي مبدل من النوع $[\hat{H},\hat{A}]$ يساوي الصفر مهما كان $\hat{A}$ لأن :

$$\langle [\hat{H},\hat{A}] \rangle = \langle (\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}) \rangle = \langle n | \hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H} | n \rangle =$$

$$= E_n \langle n | \hat{A} | n \rangle - E_n \langle n | \hat{A} | n \rangle = 0 \quad (3.87)$$

26 ـ دعوى فيريـــــل :

لنطبق العلاقة السابقة (3.87) عندما نأخذ عوضاً عن الموءثـــر $\hat{A}$ الموءثر $\hat{W}$ المعطى بالعلاقة (3.66) ولنحسب ، نتيجة لذلك ، العلاقة بين الطاقة الحركية $T(P_x, P_y, P_z)$ والطاقة الكامنة $V(x, y, z)$ ، وسنقتصر على دراسة بعد واحد ، ومن السهل أن نعمم بعد ذلك . ان متوسط المبدل $[\hat{W}, \hat{H}]$ يساوي :

$$R = \langle \psi | [\hat{W}, \hat{H}] | \psi \rangle = \langle \psi | [\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p},\ \frac{p_x^2}{2m} + \hat{V}(x)] | \psi \rangle$$

فاذا علمنا أن $\hat{p}\hat{x} = -i\hbar + \hat{x}\hat{p}$ وأن $i\hbar$ يتبادل مع $\hat{H}$ فاننا نجـد :

$$R = \langle \psi | [2\hat{x}\hat{p},\ \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x)] | \psi \rangle =$$

$$= 2 \langle \psi | [\hat{x}\hat{p},\ \frac{\hat{p}^2}{2m}] + [\hat{x}\hat{p}, \hat{V}(x)] | \psi \rangle \quad (3.88)$$

لنحسب المبدل $[\hat{x}\hat{p},\ \frac{\hat{p}^2}{2m}]$ فنجد :

$$[\hat{x}\hat{p},\ \frac{\hat{p}^2}{2m}] = \frac{1}{2m}[\hat{x}\hat{p}^2 - \hat{p}^2\hat{x}]\hat{p} = i\hbar \frac{\hat{p}^2}{2m} = i\hbar T$$

وكذلك نحسب المبدل الآخر :

$$[\hat{x}\hat{p}, \hat{V}(x)] = -i\hbar x \frac{\partial V(x)}{\partial x}$$

وبالتعويض في (3.88) نحصل على المعادلة التي ينعدم طرفاها طبقـاً لِـ (3.87) أي أن :

$$\langle \psi | \hat{W}\hat{H} - \hat{H}\hat{W} | \psi \rangle = i\hbar \left\{ \langle \psi | 2T | \psi \rangle - \langle \psi | x \frac{\partial V}{\partial x} | \psi \rangle \right\} = 0$$

واذا فرضنا الآن أن الجسيم يخضع لكمون من الشكل $V(r) = V_0 r^n$ واستخدمنا الاحداثيات الكروية ، نجد بعد تعميم العلاقة السابقة والاختصـــار على $i\hbar$ ما يلي :

$$\langle \psi | 2T | \psi \rangle - \langle \psi | r \nabla V | \psi \rangle = 0$$

(3.89)

ثم اذا حسبنا $r \nabla V$ فاننا نجد :

$$r \nabla V = r \frac{\partial V}{\partial r} = n r V_0 r^{n-1} = n V$$

وبالتعويض في (3.89) نجد أخيراً التعبير الرياضي عن دعوى فيريال:

$$\bar{T} = \frac{n}{2} \bar{V}$$

(3.90)

لنبرهن في نهاية هذه الفقرة علاقة ثانية تحققها الحالات المستقرة ، ولهذا نأخذ المبدل $[\hat{r}, \hat{H}]$ الذي يساوي $i\hbar P/m$ ونحسب العنصر المصفوفي من الطرفين فنجد :

$$\frac{i\hbar}{m} \langle \psi_n | \hat{P} | \psi_k \rangle = \langle \psi_n | \hat{r}\hat{H} - \hat{H}\hat{r} | \psi_k \rangle$$

والاستفادة من هرميتية المؤثر $\hat{H}$ نضع الطرف الأيمن بالشكل:

$E_k \langle \psi_n | \hat{r} | \psi_k \rangle - E_n \langle \psi_n | \hat{r} | \psi_k \rangle$ ، أي أن :

$$\frac{i\hbar}{m} \langle \psi_n | \hat{P} | \psi_k \rangle = (E_k - E_n) \langle \psi_n | \hat{r} | \psi_k \rangle \qquad (3.91)$$

وهي العلاقة المطلوبة .

27 - دراسة الهزاز التوافقي بطريقة المؤثرات . حساب القيم الخاصة والتوابع الخاصة :

سنرى في الفقرة كيف أنه يمكن الوصول الى النتائج نفسها التي حصلنا عليها في الفصل السابق ، فنحسب طاقة الهزاز التوافقي وتوابعه الخاصة ولكن دون حل معادلة شرودنغر هذه المرة وانما بالاستفادة من المؤثرات لاغير.

ليكن مؤثر هاملتون التالي للهزاز :

$$\hat{H} = \hat{P}^2/2m + m\omega^2 \hat{x}^2/2$$

ولنجر التحويل التالي :

$$\hat{\mathcal{P}} = \hat{P}/\sqrt{m\omega\hbar}, \quad \hat{Q} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, \hat{x}$$

فنجد أن $\hat{H}$ يتحول الى الشكل :

(3.92)

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{\mathcal{P}}^2 + \hat{Q}^2)$$

أما العلاقة بين المؤثرين $\hat{\mathcal{P}}$ و $\hat{Q}$ فتحسب كما يلي :

∂Q

$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} P = \frac{-i\hbar}{\sqrt{m\omega\hbar}} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{-i\hbar}{\sqrt{m\omega\hbar}} \frac{\partial}{\partial Q} \frac{\partial Q}{\partial x} = -i \frac{\partial}{\partial Q}$$

ولحساب المبدل $[\hat{P}, \hat{Q}]$ نكتب :

$$[\hat{P}, \hat{Q}] f(\hat{Q}) = [-i \frac{\partial}{\partial Q}, \hat{Q}] f(\hat{Q}) = -i f(\hat{Q})$$

اي أن :

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = -i \qquad (3.93)$$

لنعرف الآن الموءثر $\hat{a}$ بالعلاقة :

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} + i\hat{P}) \qquad (3.94)$$

ومرافقه الزائدي :

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{Q} - i\hat{P}) \qquad (3.95)$$

ولنحسب المبدل $[\hat{a}, \hat{a}^+]$ فنجد :

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1 \qquad (3.96)$$

ثم نعبر عن الموءثر $\hat{H}$ بدلالة الموءثرين $\hat{a}$ و $\hat{a}^+$ ولهذا نحسب $\hat{P}^2 + \hat{Q}^2$ فنجد أولاً بحل المعادلتين (3.94) و (3.95) بالنسبة الى $\hat{Q}$ و $\hat{P}$ فنجد :

$$\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{a}^+ - \hat{a}) \quad , \quad \hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}^+ + \hat{a})$$

وبالتربيع والجمع نحصل على العلاقة :

$$\hat{P}^2 + \hat{Q}^2 = \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+$$

وبالتبديل في (3.92) نجد :

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+) = \frac{\hbar\omega}{2} (2\hat{a}^+\hat{a} + 1) = \hbar\omega (\hat{a}\hat{a}^+ - \tfrac{1}{2}) = \hbar\omega (\hat{a}^+\hat{a} + \tfrac{1}{2}) \quad (3.97)$$

وسنحسب الآن القيم الخاصة للموءثر $\hat{H}$ بالاستناد الى ماسبق ولذلك نكتب معادلة شرودنغر التالية (باستخدام رموز ديراك):

$$\hat{H}|\psi\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} (2\hat{a}^+\hat{a} + 1)|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

التي توضع بالشكل :

$$(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2})|\psi\rangle = (\hat{a}\hat{a}^+ - \frac{1}{2})|\psi\rangle = \frac{E}{\hbar\omega}|\psi\rangle = \varepsilon|\psi\rangle \quad (3.98a)$$

أو :

$$\hat{H}|\psi_\varepsilon\rangle = \varepsilon|\psi_\varepsilon\rangle \quad (3.98b)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathcal{H}}}{\hbar\omega} = \hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2} = \hat{a}\hat{a}^+ - \frac{1}{2}$$ (موءثــــر

حيث $\varepsilon = E/\hbar\omega$ و $|\psi_\varepsilon\rangle$ هو التابع الخاص (الكيت) الموافق للقيمة الخاصة ε . وهكذا تتحول المسألة حساب القيم الخاصة والتوابــع الخاصة للموءثر $\hat{H}$. وهذا ما سنفعله فيما يلي بالاستناد الــى جبر الموءثرات . لنوءثر على طرفي المعادلة (3.98) بالموءثر $\hat{a}^+$ فنجد :

$$\hat{a}^+(\hat{a}\hat{a}^+ - \frac{1}{2})|\psi_\varepsilon\rangle = \hat{a}^+\varepsilon|\psi_\varepsilon\rangle = \varepsilon\,\hat{a}^+|\psi_\varepsilon\rangle$$

ومنــــه :

$$(\hat{a}^+\hat{a} - \frac{1}{2})\,\hat{a}^+|\psi_\varepsilon\rangle = \varepsilon\,\hat{a}^+|\psi_\varepsilon\rangle \quad (3.98c)$$

فاذا علمنا أنه طبقاً لِ (3.97) يكون : $\hat{a}^+\hat{a} - \frac{1}{2} = \hat{H} - 1$

وبالتالي يمكن وضع المعادلة السابقة بالشكل :

$$(\hat{H}-1)(\hat{a}^+|\psi_\varepsilon\rangle) = \varepsilon(\hat{a}^+|\psi_\varepsilon\rangle) \Rightarrow \hat{H}(\hat{a}^+|\psi_\varepsilon\rangle) = (\varepsilon+1)(\hat{a}^+|\psi_\varepsilon\rangle) \quad (3.98d)$$

وبما أن $\varepsilon + 1$ تتعلق بالقيمة الخاصة التالية فلا بد أن يتعلــق $\hat{a}^+\psi_\varepsilon$ بالتابع الخاص الذي يلي ψ_ε أي أن :

$$\hat{a}^+\psi_\varepsilon = q\,\psi_{\varepsilon+1} \quad (3.99)$$

حيث q عدد ثابت يمكن حسابه من شرط التنظيم ، ولهذا نكتــب الجداء العددي :

$$\langle\hat{a}^+\psi_\varepsilon|\hat{a}^+\psi_\varepsilon\rangle = (\langle\psi|(\hat{a}^+)^+\hat{a}^+|\psi_\varepsilon\rangle)^* = \langle\psi_\varepsilon|\hat{a}\hat{a}^+|\psi_\varepsilon\rangle = \quad (3.100)$$

$$= q^2\langle\psi_{\varepsilon+1}|\psi_{\varepsilon+1}\rangle = q^2$$

ومن جهة ثانية يمكن حساب $\hat{a}\hat{a}^{+}|\psi_{\varepsilon}\rangle$ و $\hat{a}^{+}\hat{a}|\psi_{\varepsilon}\rangle$ انطلاقاً من (3.98a) حيث نجد :

$$\hat{a}\hat{a}^{+}|\psi_{\varepsilon}\rangle = (\varepsilon+\tfrac{1}{2})\,\psi_{\varepsilon}\ ,\quad \hat{a}^{+}\hat{a}|\psi_{\varepsilon}\rangle = (\varepsilon-\tfrac{1}{2})|\psi_{\varepsilon}\rangle \qquad (3.101)$$

وبالاستفادة من (3.100) نحسب قيمة q^2 حيث نجد :

$$\langle\psi_{\varepsilon}|\hat{a}\hat{a}^{+}|\psi_{\varepsilon}\rangle = q^2\langle\psi_{\varepsilon+1}|\psi_{\varepsilon+1}\rangle = (\varepsilon+\tfrac{1}{2})\langle\psi_{\varepsilon}|\psi_{\varepsilon}\rangle$$

ومنـــــه :

$$q = \sqrt{(\varepsilon+\tfrac{1}{2})} \qquad (3.102)$$

وعندئذ نجد بالتعويض في (3.99) أن :

$$\hat{a}^{+}|\psi_{\varepsilon}\rangle = \sqrt{\varepsilon+\tfrac{1}{2}}\ |\psi_{\varepsilon+1}\rangle \qquad (3.103a)$$

واذا أعدنا الخطوات نفسها انطلاقاً من عبارة $\hat{H}$ الثانية التي تساوي $\hat{a}^{+}\hat{a}-\frac{1}{2}$ فاننا نجد :

$$\hat{a}|\psi_{\varepsilon}\rangle = \sqrt{\varepsilon-\tfrac{1}{2}}\ |\psi_{\varepsilon-1}\rangle \qquad (3.103b)$$

فالموءثر $\hat{a}^{+}$ يزيد في التابع الخاص وبالتالي في القيمة الخاصة فهو دائماً ينقلنا الى التابع التالي ولذلك يسمى موءثر الخلق أو موءثر التكوين (Creation operator). أما الموءثر $\hat{a}$ فهو ينقص من القيمة الخاصة وبالتالي ينقلنا الى التابع الأخفض ولهذا يسمى موءثـــــر الانعدام أو الفناء (Annihilation operator). لنحسب أصغر طاقـــة ممكنة ولهذا نوءثر بالموءثر $\hat{a}$ على أول تابع خاص $|\psi_0\rangle$، ومـــن الطبيعي أن يكون المقدار $\hat{a}|\psi_0\rangle = 0$ لأنه لايوجد توابع أخفض مـــن $|\psi_0\rangle$، ثم نوءثر بـ $\hat{a}^{+}$ على $\hat{a}|\psi_0\rangle$ فنجد:

$$\hat{a}^{+}\hat{a}|\psi_0\rangle = \hat{a}^{+}.0 = 0 \Rightarrow \hat{a}^{+}\hat{a}|0\rangle = 0$$

(حيث رمزنا لـ $|\psi_0\rangle$ بالرمز $|0\rangle$) ثم نوءثر بـ $\hat{H}$ على هـــذه

الحالة $|0\rangle$ فنجد:

$$\hat{H}|0\rangle = (\hat{a}^{+}\hat{a} + \frac{1}{2})|0\rangle = \varepsilon|0\rangle$$

ومنه نجد أصغر طاقة ممكنة هي $\varepsilon = 1/2$ وهذا يقابل طاقة E تساوي $\hbar\omega/2$. وبما أنه طبقاً لـ $(3.98d)$ يجب أن تزداد الطاقة بمقدار 1 عندما ننتقل الى الحالة التالية فان الطاقة التاليـة $\varepsilon_1 = \frac{1}{2} + 1$ المقابلة للحالة $|\psi_1\rangle = |1\rangle$. أما الطاقة المقابلة للحالة $|\psi_n\rangle = |n\rangle$ فهي :

$$\varepsilon_n = n + \frac{1}{2} \Rightarrow E_n = \hbar\omega\,(n + \frac{1}{2}) \qquad (3.104)$$

وهكذا حصلنا الآن على القيم الخاصة نفسها التي حصلنا عليها فـي الفصل الثاني انطلاقاً من حل معادلة شرودنغر . هذا ويتم حساب التوابع الخاصة كما يلي :

نوءثر أولاً بالموءثر $\hat{a}$ على الحالة $|0\rangle$ فنجد:

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + i\hat{P})|0\rangle = 0$$

ومنـــه :

$$\hat{Q}|0\rangle \equiv \hat{Q}|\psi_0\rangle = (-i)(-i)\frac{\partial}{\partial Q}|\psi_0\rangle = \frac{\partial|\psi_0\rangle}{\partial Q}$$

وبحل هذه المعادلة التفاضلية نجد:

$$|0\rangle \equiv |\psi_0\rangle = \psi_0 = A_0\, e^{-Q^2/2}$$

ولحساب A_0 نستخدم شرط التنظيم :

$$\langle 0|0\rangle = A_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-Q^2}\, dQ = 1 \Rightarrow A_0 = \pi^{-1/4}$$

وبالتالي يكون التابع المنظم المقابل للحالة $|0\rangle$ هو :

$$\psi_0(Q) = \pi^{-1/4}\, e^{-Q^2/2}$$

وبتبديل Q بقيمتها بدلالة x نحصل على النتيجة نفسها التـــي رأيناها في الفصل الثاني .

ولحساب $\psi_n(Q)$ نستخدم العلاقة $(3.103a)$ التي توضع بالشكل :

$$\hat{a}^{+}|\psi_\varepsilon\rangle \equiv \hat{a}^{+}|\psi_{\varepsilon_n}\rangle \equiv \hat{a}^{+}\psi_n \equiv \hat{a}^{+}|n\rangle = \sqrt{\varepsilon_n + \frac{1}{2}}\,\psi_{n+1} = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

واذا أثر $\hat{a}^{+}$ على التابع الأخفض بمرتبة فاننا نحصل على المعادلة :

$$\hat{a}^{+}|n-1\rangle = \sqrt{n}\,|n\rangle$$

ومنه نحسب التابع الخاص $|n\rangle$ بدلالة $|n-1\rangle$ ثم بدلالة $|n-2\rangle$ ...
وهكذا حتى نصل الى التابع الخاص الأول $|0\rangle$ الذي حسبناه سابقاً
أي أن :

$$|n\rangle = \frac{\hat{a}^{+}}{\sqrt{n}}|n-1\rangle = \frac{\hat{a}^{+}}{\sqrt{n}}\frac{\hat{a}^{+}}{\sqrt{n-1}}|n-2\rangle = \frac{\hat{a}^{+}}{\sqrt{n}}\frac{\hat{a}^{+}}{\sqrt{n-1}}\frac{\hat{a}^{+}}{\sqrt{n-2}}|n-3\rangle = \frac{(\hat{a}^{+})^{n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

وبتعويض $(\hat{a}^{+})^{n}$ بقيمتها $\frac{1}{\sqrt{2}}(Q+iP)^{n} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q-\frac{\partial}{\partial Q}\right)^{n}$ نحصل على
العلاقة :

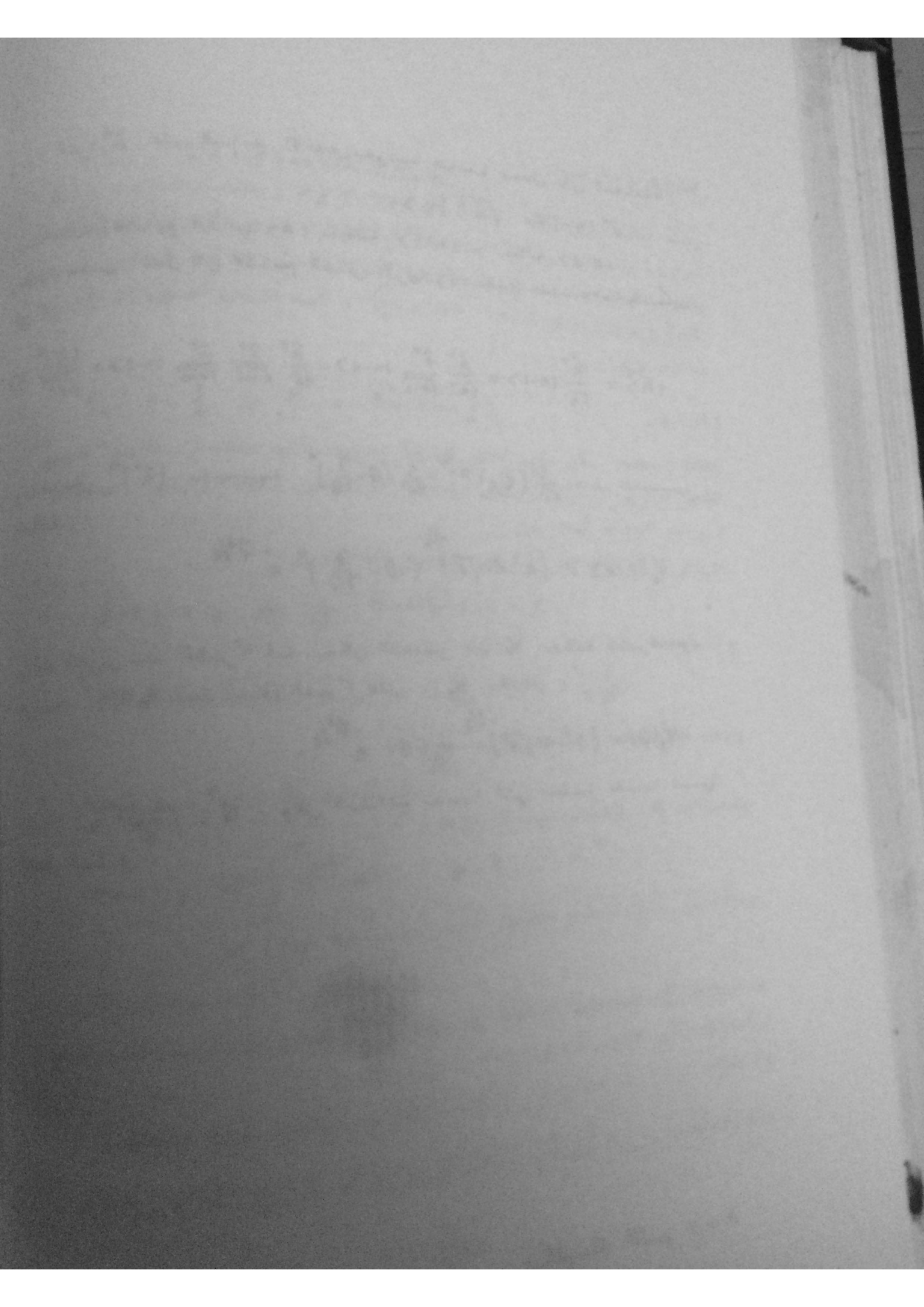
$$\psi_n \equiv |n\rangle = \left(2^{n} n! \sqrt{\pi}\right)^{-1/2}\left(Q-\frac{\partial}{\partial Q}\right)^{n} e^{-Q^2/2}$$

وبفك القوس نجد أخيراً أنه يمكن التعبير عن ψ_n بدلالة كثيرة حدود
هرميت $H_n(Q)$ حيث نحصل أخيراً على ψ_n بالشكل :

$$\psi_n(Q) = \left(2^{n} n! \sqrt{\pi}\right)^{-1/2} H_n(Q)\, e^{-Q^2/2}$$

حيث $Q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x$. وهي النتائج نفسها التي حصلنا عليها في
الفصل السابق .





مسائل الفصل الثالث

1 - المؤثران $\hat{A}$ و $\hat{B}$ هرميتيان وخطيان ويحققان العلاقة $\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=i\hbar$ وليكن التكامل :

$$I(\alpha)=\int_{-\infty}^{+\infty}|\hat{A}\psi+i\alpha\hat{B}\psi|^2\,dx$$

حيث α وسيط حقيقي $(\alpha\in\mathbb{R})$ غير تابع للاحداثيات .

آ- برهن صحة العلاقة : $\langle\hat{A}^2\rangle\langle\hat{B}^2\rangle\geqslant\hbar^2/4$

ب - استنتج علاقة الشك التي تربط الاحداثي $\hat{x}$ بالاندفاع $\hat{P}_x$.

ج - استفد من ذلك لحساب أصغر طاقة لهزاز توافقي كمونه :

$$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

2 - آ - أحسب المبدل $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]$ بدلالة المبدلين $[\hat{A},\hat{B}]$ ، $[\hat{A},\hat{C}]$.

ب - استفد من ذلك لحساب المبدلين $[\hat{P}_x,[\hat{P}_x,\hat{x}^2]]$ ، $[\hat{x},[\hat{x},\hat{P}_x^2]]$.

3 - ليكن $\hat{A}(t),\hat{B}(t)$ موءثرين تابعين للزمن t ، ولنعرف مشتق موءثر بالنسبة للزمن بالعلاقة :

$$\frac{d}{dt}\hat{A}(t)=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{\hat{A}(t+\Delta t)-\hat{A}(t)}{\Delta t}$$

والمطلوب البرهان على ما يلي :

آ - $\frac{d}{dt}[\hat{A}(t),\hat{B}(t)]=[\frac{d}{dt}\hat{A}(t),\hat{B}(t)]+[\hat{A}(t),\frac{d}{dt}\hat{B}(t)]$

ب - $\frac{d}{dt}\hat{A}^{-1}(t)=\hat{A}^{-1}(t)\,(\frac{d}{dt}\hat{A}(t))\,\hat{A}^{-1}(t)$

4 - ليكن الكمون الشعاعي $\vec{A}(r)$ الذي يشتق منه الحقل المغناطيسي $\vec{B}=\overrightarrow{rot}\vec{A}$. احسب المقدار

5 - قارن بين الموءثرين $(\nabla_x\hat{x})^2$ ، $(\hat{x}\nabla_x)^2$.

6 - اذا علمت أن $[\hat{c},\hat{a}]=\lambda\hat{a}$ وأن $\hat{a}\psi=a\psi$ فاحسب $\hat{c}$.

7 - اذا علمت أن $[\hat{a},\hat{b}]=\hat{c}$ ، $[\hat{c},\hat{a}]=\lambda\hat{a}$ فاحسب $[\hat{b},\hat{c}]$.

(توجيه : استخدم مطابقة جاكوبي)

8 - احسب المرافقات الزائدية للموءثرات التالية :

$\frac{\partial}{\partial x}$ ، $i\frac{\partial}{\partial x}$ ، $\frac{\partial^n}{\partial x^n}$ ، $\Delta\equiv\nabla^2$

ثم استنتج اذا كانت هذه الموءثرات هرميتية أم لا .

و ـ ليكن الموءثران $\hat{a}^+ , \hat{a}$ اللذان يحققان العلاقة $[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{I}$ ،

ولتكن الموءثرات :

$$\hat{A}_1 = \frac{\hat{a}^+\hat{a}^+ + \hat{a}\hat{a}}{4} , \quad A_2 = \frac{\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+}{4} , \quad A_3 = i\frac{\hat{a}^+\hat{a}^+ - \hat{a}\hat{a}}{4}$$

والمطلوب حساب المبدل $[\hat{A}_i , \hat{A}_j] \; : (i, j = 1, 2, 3)$.

10 ـ آ ـ اذا حقق الموءثران $\hat{F}, \hat{R}$ العلاقة : $[\hat{F}, \hat{R}] = \hat{F}\hat{R} - \hat{R}\hat{F} = 1$

فاحسب المبدل $[\hat{F}, \hat{R}^2]$.

ب ـ احسب المبدل $[\hat{F}, \hat{R}^n]$ استناداً الى الطلب الأول ثم استنتج المبدل $[\hat{F}, \hat{R}^{n+1}]$ واستفد من ذلك لحساب المبدل $[\hat{F}, g(\hat{R})]$.

11 ـ اذا فرضنا أن $\hat{b}, \hat{c}$ موءثران ما فأثبت صحة العلاقة :

$$e^{\hat{b}} \hat{c} e^{-\hat{b}} = \hat{c} + \frac{1}{1!} [\hat{b}, \hat{c}] + \frac{1}{2!} [\hat{b}, [\hat{b}, \hat{c}]] + \dots$$

12 ـ برهن أن التوابع الخاصة لموءثر كمية الحركة $\hat{P} = -i\hbar \nabla$ ،

هي من الشكل : $\psi(\vec{r}) = A \, e^{\frac{i}{\hbar} \vec{P}.\vec{r}}$

احسب الثابت A في الحالة الخاصة عندما تكون الحركة ذات بعد واحد ثم عمم ذلك عندما تحدث الحركة في ثلاثة أبعاد .

13 ـ توءلف المتجهات الخاصة φ_i (التوابع الخاصة) أساساً تاماً أي أنها تحقق العلاقات :

$$\hat{A} \varphi_i = a_i \varphi_i \quad : (\forall a_i \in \mathbb{C})$$

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \int \varphi_i^* \varphi_j \, dx = \delta_{ij}$$

آ ـ برهن أن φ_i هو متجه خاص للموءثر $\hat{A}^+$ مقابل للقيمة a_i^* .

ب ـ احسب المبدل $[\hat{A}, \hat{A}^+]$.

ج ـ اذا قسمنا الموءثر $\hat{A}$ الى قسمين : هرميتي وغير هرميتي طبقاً للعلاقة : $\hat{A} = \hat{P} + i\hat{q}$ فاحسب المبدل $[\hat{P}, \hat{q}]$.

14 ـ أوجد الموءثر الذي يحول التابع $\psi(x)$ الى $\psi(x+a)$ ثم ادرس

هرميتية هذا الموءثر .

15 - عندما يتحرك جسيم كتلته m وشحنته q في حقل مغناطيسي $\vec{B}$ يشتق من كمون $\vec{A}$ فان اندفاعه $\hat{P}$ يعطى بالعلاقة :

$$\vec{P} = m\vec{V} = \vec{p} - q\vec{A}$$

فاذا فرضنا أن $\hat{V}_x$ ، $\hat{V}_y$ ، $\hat{V}_z$ هي مركبات موءثر السرعة على المحاور الاحداثية فيطلب ما يلي :

آ - برهن أن الموءثرات $\hat{V}_x$ ، $\hat{V}_y$ ، $\hat{V}_z$ هي موءثرات هرميتيه

ب - احسب المبدل $[\hat{V}_x , \hat{V}_y]$ في الحالة الخاصة عندما يتجه $\vec{B}$ باتجاه المحور oz .

16 - ليكن $\hat{U}$ موءثراً واحدياً . برهن أن الموءثر $\hat{P}$ المعطى بالعلاقة :

$$\hat{P} = i\,\frac{\hat{U} - 1}{\hat{U} + 1}$$

لابد أن يكون هرميتياً .

17 - اذا كان $\hat{A}$ موءثرا هرميتياً فبرهن أن $(d\hat{A}/dt)$ هو موءثر هرميتي أيضاً .

18 - اذا كان $\hat{A} = \hat{A}^+$ فبرهن أن الموءثر $e^{i\hat{A}}$ هو موءثر واحدي .

19 - اذا كان $\hat{A}$ موءثرا هرميتياً فبرهن أن الموءثر $\hat{P}$ التالي :

$$\hat{P} = \frac{1 - i\hat{A}}{1 + i\hat{A}}$$

هو هرميتي أيضاً .

20 - اذا كان $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$ و $[\hat{A}, \hat{C}] = 0$ فبرهن أن :

$$[F(\hat{A}), \hat{B}] = \hat{C}\,\frac{dF(\hat{A})}{d\hat{A}}$$

21 - أثبت أن $e^{\hat{A}}\,e^{-\hat{A}} = 1$ حيث $\hat{A}$ موءثرما .

22 - ليكن $\hat{R}, \hat{F}$ موءثرين خطين هرميتيين . لناخذ الموءثرين

$$\hat{S} = \frac{1}{2}(\hat{R}\hat{F} + \hat{F}\hat{R}) \quad , \quad \hat{G} = i(\hat{R}\hat{F} - \hat{F}\hat{R})$$

برهن ان :

$$\langle \hat{F}^2 \rangle \langle \hat{R}^2 \rangle = \frac{1}{4} \langle \hat{G}^2 \rangle + \langle \hat{S}^2 \rangle$$

23 ـ ليكن $\hat{A}$ موءثراً اختيارياً ، $\hat{A}^+$ مرافقه الزائدي • وليكن الموءثر $\hat{H}$ المعرف بالعلاقة $\hat{H} = \hat{A}\hat{A}^+$ • أثبت مايلي :

آ ـ القيمة الوسطى لـ $\hat{H}$ موجبة دوماً •

ب ـ $\hat{H}$ هرميتي •

جـ ـ القيم الخاصة لـ $\hat{H}$ أعداد موجبة •

د ـ تحقق من صحة العلاقة :

$$|\langle \varphi | \hat{H} | \psi \rangle|^2 \leqslant \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$$

وذلك مهما كان كل من التابعين ψ و φ •

24 ـ احسب مربع الموءثر $\frac{d}{dx} + \hat{x}$ ومكعب الموءثر $\frac{d}{dx} + \frac{1}{\hat{x}}$ •

25 ـ احسب الموءثر الذي يحول التابع $\psi(\varphi)$ الى $\psi(\varphi + \alpha)$ (φ متحول زاوي)

26 ـ احسب الموءثر المرافق للموءثر $e^{i\alpha \frac{d}{d\varphi}}$ واستنتج فيما اذاكان هذا الموءثر هرميتياً •

27 ـ برهن أن موءثر الجداء بتابع حقيقي هو موءثر هرميتي •

28 ـ احسب جداء الموءثرين $\hat{L} + \hat{M}$ و $\hat{L} - \hat{M}$ •

29 ـ احسب التوابع الخاصة والقيم الخاصة للموءثرين : $i\frac{d}{dx}$ ، $\frac{d}{dx}$ •

30 ـ أعد السوءال نفسه من أجل الموءثرات التاليه :

$$e^{i\alpha \frac{d}{d\varphi}} \quad , \quad \cos i\frac{d}{d\varphi} \quad , \quad \sin \frac{d}{d\varphi}$$

$$\frac{d}{d\varphi} \quad , \quad x + \frac{d}{dx} \quad , \quad \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2}{x}\frac{d}{dx}$$

31 ـ برهن صحة مطابقة جاكوبي التالية :

$$[[\hat{p}, \hat{q}], \hat{r}] + [[\hat{q}, \hat{r}], \hat{p}] + [[\hat{r}, \hat{p}], \hat{q}] = 0$$

32 ـ ليكن الموءثران $\hat{c}$ ، $\hat{c}^+$ اللذان يحققان العلاقتين :

$$\hat{c}\,\hat{c} = 0 \quad , \quad \hat{c}\,\hat{c}^{+} + \hat{c}^{+}\hat{c} = \hat{1}$$

ولنعرف المؤثرات :

$$\hat{c}_1 = \frac{\hat{c} + \hat{c}^{+}}{2} \quad , \quad \hat{c}_2 = \frac{\hat{c}^{+} - \hat{c}}{2} \quad , \quad \hat{c}_3 = \frac{\hat{c}^{+}\hat{c} - \hat{c}\,\hat{c}^{+}}{2}$$

والمطلوب حساب المبدلات :

$$[\hat{c}_i , \hat{c}_j] \; : (i, j = 1, 2, 3).$$

33 ـ لتكن المؤثرات المعرفة بالعلاقات :

(مؤثر الانعكاس) $\hat{P} : \hat{P}\,\Psi(x) = \Psi(-x)$

(مؤثر الانسحاب) $\hat{T}_a : \hat{T}_a\,\Psi(x) = \Psi(x+a)$

(المؤثر التخيلي أو العقدي) $\hat{K} : \hat{K}\,\Psi(x) = \Psi^{*}(x)$

آ ـ هل هذه المؤثرات خطيه .

ب ـ أحسب المؤثرات المرافقة لها ثم المعاكسة لها .

34 ـ ليكن $\hat{L}$ موءثرا خطياً . يطلب البرهان على صحة ما يلي :

آ ـ $(\hat{L}^{+})^{+} = \hat{L}$

ب ـ المؤثران $\hat{L}\hat{L}^{+}$ و $\hat{L}^{+}\hat{L}$ هرميتيان .

جـ ـ المؤثران $\hat{L} + \hat{L}^{+}$ و $i(\hat{L} - \hat{L}^{+})$ هرميتيان أيضاً .

35 ـ اذا كان المؤثران $\hat{A}$ و $\hat{B}$ خطيين وهرميتيين فبرهـــن هرميتية المؤثرين :

$$\hat{C} = \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}) \quad , \quad \hat{D} = \frac{i}{2}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}).$$

36 ـ اذا كان المؤثران $\hat{A}$ و $\hat{B}$ لاتبادليين فبرهن أن :

$$(\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A})^{2} = \hat{A}^{-1}\hat{B}^{2}\hat{A} \quad , \quad (\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A})^{n} = \hat{A}^{-1}\hat{B}^{n}\hat{A}.$$

37 ـ برهن أنه يمكن كتابة أي موءثر اختياري $\hat{F}$ بالشكل :

$$\hat{F} = \hat{A} + i\hat{B}$$

حيث $\hat{A}$ و $\hat{B}$ موءثرين هرميتيين .

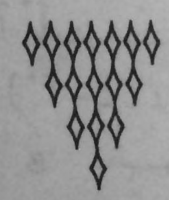
38 ـ المؤثر $\hat{F}$ غير هرميتي . ما هو الشرط اللازم ، تحققه لكـــي يكون المؤثر $\hat{F}^{2}$ هرميتياً ؟

39 – برهن صحة الخاصة التوزيعية في جبر الموءثرات ، أي أن :

$$\left[\sum_i \hat{A}_i , \sum_k \hat{B}_k \right] = \sum_{i,k} \left[\hat{A}_i , \hat{B}_k \right].$$

40 – برهن أن التابع : $f(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2}$

هو تابع خاص للموءثر $\frac{d^2}{dx^2} - \hat{x}^2$ ثم أحسب القيم الخاصة المقابلة .



$F = m v' = \dot{p} \Rightarrow r \wedge F = r \wedge m v' = r \wedge \dot{p}$

$\Rightarrow \frac{d}{dt}[r \wedge m v'] = \frac{d}{dt}[r \wedge \dot{p}] \Rightarrow \frac{d}{dt}[r \wedge m v]$

الفصل الرابع

$= m[\dot{r} \wedge v] + m[r \wedge v']$

$= m[\dot{r} \wedge v] + m[r \wedge v'] = [r \wedge m v']$

$\frac{d}{dt}[r \wedge m v] = [r \wedge F]$

$\Leftrightarrow \frac{d}{dt}[r \wedge p] = [r \wedge F]$

يسمى $r \wedge p$ العزم الزاوي

العزم الحركي

28 – تعريف العزم الحركي ، حساب المركبات في الاحداثيات الديكارتية والكروية :

آ – يعرف العزم الحركي (عزم كمية الحركة ، عزم الاندفاع ، العزم الزاوي) لجسيم في الميكانيك الكلاسيكي بالعلاقة :

$$\vec{L} = \vec{r} \times m\vec{v} = \vec{r} \times \vec{p}$$

وطبقاً للفرضية الأولى فان هذا المقدار يصبح موءثراً في ميكانيك الكم ويوضع بالشكل التالي :

$$\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \hat{r} \times \hat{\nabla} \qquad (4.1)$$

ان مركبات هذا الموءثر على المحاور الديكارتية هي :

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \ , \ \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \ , \ \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \qquad (4.2a)$$

أو بالشكل :

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \qquad (4.2b)$$

لنبرهن أولاً هرميتية هذا المؤثر ولهذا نبرهن هرميتية مركباته (ونكتفي بـ $\hat{L}_x$)

$$\hat{L}_x^+ = (\hat{y}\hat{P}_z - \hat{z}\hat{P}_y)^+ = (\hat{y}\hat{P}_z)^+ - (\hat{z}\hat{P}_y)^+ = \hat{P}_z^+\hat{y}^+ - \hat{P}_y^+\hat{z}^+ =$$

$$= \hat{P}_z\hat{y} - \hat{P}_y\hat{z} = \hat{y}\hat{P}_z - \hat{z}\hat{P}_y = \hat{L}_x$$

وقد استندنا في هذا البرهان على أن المبدلين $[\hat{y}, \hat{P}_z]$ و $[\hat{z}, \hat{P}_y]$ معدومان أي أن $\hat{y}\hat{P}_z = \hat{P}_z\hat{y}$ و $\hat{z}\hat{P}_y = \hat{P}_y\hat{z}$ ،
وبالطريقة نفسها نبرهن هرميتية بقية المركبات .
لنحسب مركبات $\hat{L}$ في الاحداثيات الكروية ولهذا يجب تحويل المشتقات بالنسبة الى x و y و z الى مشتقات بالنسبة الى r و θ و φ انطلاقاً من العلاقات التالية بين الاحداثيات الديكارتية والكروية :

$$x = r\sin\theta\cos\varphi \quad , \quad y = r\sin\theta\sin\varphi \quad , \quad z = r\cos\theta$$

مع العلم أن :

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial\psi}{\partial\theta} &= \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\theta} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\theta} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\theta} \\ \frac{\partial\psi}{\partial\varphi} &= \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial\varphi} \end{aligned}\right\} \qquad (4.3)$$

حيث ψ أي تابع للاحداثيات (x, y, z).
واذا أجرينا الاشتقاق وفرضنا $\rho = r\sin\theta$ ولاحظنا أن $\rho^2 = x^2 + y^2$ فاننا نجد :

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial\psi}{\partial\theta} &= \frac{xz}{\rho}\frac{\partial\psi}{\partial x} + \frac{yz}{\rho}\frac{\partial\psi}{\partial y} - \rho\frac{\partial\psi}{\partial z} \\ \frac{\partial\psi}{\partial\varphi} &= -y\frac{\partial\psi}{\partial x} + x\frac{\partial\psi}{\partial y} \end{aligned}\right\} \qquad (4.4)$$

وبضرب طرفي العلاقة الأخيرة $\frac{\hbar}{i}$ نجد مباشرة المركبة $\hat{L}_z$

وهـــي :

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \varphi} \qquad (4.5)$$

ولحساب $\hat{L}_y$ نضرب المعادلة الأولى من (4.4) بـ x/ρ والثانية بـ $-yz/\rho^2$ ثم نجمع العلاقتين الناتجتين طرفاً الى طـرف فنجد أخيراً :

$$z\frac{\partial\psi}{\partial x} - x\frac{\partial\psi}{\partial z} = \cos\varphi\frac{\partial\psi}{\partial\theta} - \sin\varphi\cot\theta\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}$$

وينتج مباشرة المؤثر $\hat{L}_y$ بضرب طرفي العلاقة السابقة بـ $\frac{\hbar}{i}$ حيث نجـد :

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad (4.6)$$

وأخيراً لحساب $\hat{L}_x$ نضرب المعادلة الأولى من (4.4) بـ $-y/\rho$ والثانية بـ $-xz/\rho^2$ ثم نجمع طرفاً الى طرف فنجد أخيراً عبـارة $\hat{L}_x$ التـالية : (بعد الضرب بـ $\frac{\hbar}{i}$)

$$\hat{L}_x = -\frac{\hbar}{i}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad (4.7)$$

ب ـ نعرف المؤثرين $\hat{L}_+$ ، $\hat{L}_-$ اللذين يلعبان دوراً كبيـراً في دراسة العزم الحركي بالعلاقتين :

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y \quad , \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y \qquad (4.8)$$

ومن المفيد حسابهما في الاحداثيات الكروية ولهذا نجد مباشـرة بالتعويض في (4.6) و (4.7) كلا من $\hat{L}_+$, $\hat{L}_-$ طبقاً للعلاقتين :

$$\left.\begin{aligned} \hat{L}_+ &= \hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ \hat{L}_- &= \hbar e^{-i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \end{aligned}\right\} \qquad (4.9)$$

مع العلم أنه يمكن توحيدهما بعلاقة واحدة هي :

$$\hat{L}_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi}\left(\pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

(4.10)

واذا استعضنا عن θ بمتحول جديد $x = \cos\theta$ فان العلاقة السابقة توضع بالشكل :

$$\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \hbar e^{\pm i\varphi}\left(\frac{ix}{\sqrt{1-x^2}} \frac{\partial}{\partial\varphi} \mp \sqrt{1-x^2} \frac{\partial}{\partial x}\right) \qquad (4.11)$$

ومن المفيد حساب الموءثرين $\hat{L}_+\hat{L}_-$ و $\hat{L}_-\hat{L}_+$ بدلالة الموءثرين $\hat{L}_x^2$ و $\hat{L}_y^2$ حيث نجد :

$$\left.\begin{aligned} \hat{L}_+\hat{L}_- &= (\hat{L}_x + i\hat{L}_y)(\hat{L}_x - i\hat{L}_y) = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + i[\hat{L}_y, \hat{L}_x] \\ \hat{L}_-\hat{L}_+ &= (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y) = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] \end{aligned}\right\} \qquad (4.12)$$

وبالجمع نجـــد :

$$\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+ = 2(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2)$$

أما الموءثر $\hat{L}^2$ فيساوى :

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = \frac{1}{2}(\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+) + \hat{L}_z^2 \qquad (4.13)$$

29 ـ المبدلات الأساسيـــة :

آ ـ لنحسب أولاً المبدلات من النوع $[\hat{L}_i, \hat{r}_j]$ حيث i, j تأخـــذ الأدلة $1, 2, 3$ الموافقة للمركبات x, y, z على الترتيب، وسنـــبدأ بالمبدل $[\hat{L}_x, \hat{x}]$

$$[\hat{L}_x, \hat{x}] = [\hat{y}\hat{P}_z - \hat{z}\hat{P}_y, \hat{x}]$$

وطبقاً لـ (3.11) يكون :

$$[\hat{L}_x, \hat{x}] = \hat{y}[\hat{P}_z, \hat{x}] + [\hat{y}, \hat{x}]P_z - \hat{z}[\hat{P}_y, \hat{x}] - [\hat{z}, \hat{x}]P_y = 0$$

أي أن :

$$[\hat{L}_x, \hat{x}] = 0$$

واذا حسبنا $[\hat{L}_x, \hat{y}]$ و $[\hat{L}_x, \hat{z}]$ فاننا نجد بالطريقة نفسها :

$$[\hat{L}_x, \hat{y}] = i\hbar \hat{z} \quad , \quad [\hat{L}_x, \hat{z}] = -i\hbar \hat{y}$$

ويمكن تعميم ذلك على كل المبدلات في النوع $[\hat{L}_i, \hat{r}_j]$ حيث نجد :

$$[\hat{L}_i, \hat{r}_j] = i\hbar\, \delta_{ijk}\, \hat{r}_k \qquad (4.14)$$

حيث يعرف التنسور δ_{ijk} بالعلاقة :

$$\delta_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{اذا أخذنا الأعداد } i, j, k \text{ بشكل دوري} \\ -1 & \text{اذا تغير ترتيب أي اثنين منها} \\ 0 & \text{اذا تساوى اثنان منها} \end{cases}$$

ب ـ يتم حساب المبدلات من النوع $[L_i, \hat{P}_j]$ بالطريقة نفسها؛ لناخذ مثلاً المبدل $(i = j = 1)$ ؛ $[\hat{L}_x, \hat{P}_x]$ فنجد :

$$[\hat{L}_x, \hat{P}_x] = [\hat{y}\hat{P}_z - \hat{z}\hat{P}_y, \hat{P}_x] = \hat{y}[\hat{P}_z, \hat{P}_x] + [\hat{y}, \hat{P}_x]\hat{P}_z - \hat{z}[\hat{P}_y, \hat{P}_x] - [\hat{z}, \hat{P}_x]\hat{P}_y = 0$$

أما اذا حسبنا المبدل $(i = 1, j = 2)$ ؛ $[\hat{L}_x, \hat{P}_y]$ فاننا نجد :

$$[\hat{L}_x, \hat{P}_y] = \hat{y}[\hat{P}_z, \hat{P}_y] + [\hat{y}, \hat{P}_y]\hat{P}_z - \hat{z}[\hat{P}_y, \hat{P}_y] - [\hat{z}, \hat{P}_y]\hat{P}_y = i\hbar P_z$$

وكذلك نحسب $(i = 1, j = 3)$ ؛ $[\hat{L}_x, \hat{P}_z]$ حيث نجد :

$$[\hat{L}_x, \hat{P}_z] = -i\hbar \hat{P}_y$$

ويمكن تعميم العلاقات الثلاث السابقة بالعلاقة :

$$[\hat{L}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\, \delta_{ijk}\, \hat{P}_k \qquad (4.15)$$

جـ ـ من السهل حساب المبدلات من النوع $[\hat{L}_i, \hat{r}\hat{P}]$ و $[\hat{L}_i, \hat{P}^2]$ و $[\hat{L}_i, \hat{r}^2]$ وذلك بتبديل كل من $\hat{r}^2$ و $\hat{P}^2$ و $\hat{r}\hat{P}$ بقيمها ثم الاستفادة من العلاقة (3.11) حيث نجد :

$$[\hat{L}_i, \hat{r}^2] = [\hat{L}_i, \hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2] = [\hat{L}_i, \hat{x}^2] + [\hat{L}_i, \hat{y}^2] + [\hat{L}_i, \hat{z}^2] = 0 \qquad (4.16)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{P}^2] = [\hat{L}_i, \hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2] = [\hat{L}_i, \hat{P}_x^2] + [\hat{L}_i, \hat{P}_y^2] + [\hat{L}_i, \hat{P}_z^2] = 0 \qquad (4.17)$$

$$[\hat{L}_i, \hat{r}\hat{P}] = [\hat{L}_i, \hat{x}\hat{P}_x + \hat{y}\hat{P}_y + \hat{z}\hat{P}_z] = [\hat{L}_i, \hat{x}\hat{P}_x] + [\hat{L}_i, \hat{y}\hat{P}_y] + [\hat{L}_i, \hat{z}\hat{P}_z] = 0 \qquad (4.18)$$

كما يمكن البرهان أن $\hat{L}^2$ يتبادل مع كل من مركباته أي أن :

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_i] = 0 \quad (4.19)$$

د ـ أما حساب المبدلات $[\hat{L}_i, \hat{L}_j]$ فيتم كما يلي :

نحسب أولاً $(i=1, j=2)$: $[\hat{L}_x, \hat{L}_y]$ فنجد :

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{L}_x, \hat{z}\hat{P}_x - \hat{x}\hat{P}_z] = [\hat{L}_x, \hat{z}\hat{P}_x] - [\hat{L}_x, \hat{x}\hat{P}_z] =$$

$$= [\hat{L}_x, \hat{z}]\hat{P}_x + \hat{z}[\hat{L}_x, \hat{P}_x] - [\hat{L}_x, \hat{x}]\hat{P}_z - \hat{x}[\hat{L}_x, \hat{P}_z] =$$

$$= -i\hbar\,\hat{y}\hat{P}_x + i\hbar\,\hat{x}\hat{P}_y = i\hbar(\hat{x}\hat{P}_y - \hat{y}\hat{P}_x) = i\hbar\hat{L}_z$$

وبتعميم العلاقة السابقة يكون :

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\,\delta_{ijk}\,\hat{L}_k \quad (4.20a)$$

او بالشكل :

$$\hat{L} \times \hat{L} = i\hbar\hat{L} \quad (4.20b)$$

ومن السهل الآن التأكد من صحة (4.19)؛ لنبرهن مثلاً أن المبدل $[\hat{L}^2, \hat{L}_x]$ يساوي الصفر ولهذا نكتب:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_y^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z^2, \hat{L}_x] =$$

$$= \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_x]\hat{L}_y + \hat{L}_z[\hat{L}_z, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x]L_z = 0$$

هـ ـ من المفيد عند حساب القيم الخاصة لموءثر العزم الحركي أن نعرف المبدلات $[\hat{L}_\pm, \hat{L}_z]$ و $[\hat{L}_+, \hat{L}_-]$ ولهذا نحسبهما الآن :

$$[\hat{L}_\pm, \hat{L}_z] = [\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y, \hat{L}_z] = [\hat{L}_x, \hat{L}_z] \pm i[\hat{L}_y, \hat{L}_z] =$$

$$= -i\hbar\hat{L}_y \pm i(i\hbar\hat{L}_x) = \mp\hbar\hat{L}_x - i\hbar\hat{L}_y = \mp\hbar(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y)$$

أي أن :

$$[\hat{L}_\pm, \hat{L}_z] = \mp\hbar\,\hat{L}_\pm \quad (4.21)$$

أما المبدل $[\hat{L}_+, \hat{L}_-]$ فيساوي :

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = [\hat{L}_x + i\hat{L}_y, \hat{L}_x + i\hat{L}_y] = 2\hbar\hat{L}_z \quad (4.22)$$

$\hat{L}_x - i\hat{L}_y$

و ـ لندرس أخيراً تبادل العزم الحركي مع موءثر هاملتون ، ولهذا نفرض جسيما كتلته m واندفاعه P يتحرك في حقل كمون من الشكل $V(x,y,z)$ فيكون موءثرهاملتون له :

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(x,y,z)$$

أما المبدل $[\hat{L},\hat{H}]$ فيحسب كما يلي :

$$[\hat{L},\hat{H}] = [\hat{L}, \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}] = \frac{1}{2m}[\hat{L},\hat{P}^2] + [\hat{L},\hat{V}] = [\hat{L},\hat{V}]$$

مع العلم أننا استفدنا من تبادل $\hat{L}$ مع P^2 طبقاً لـ (4.17).

ولحساب $[\hat{L},\hat{V}]$ نكتبه بالشكل :

$$[\hat{L},\hat{V}] = [\hat{L}_x,\hat{V}]\vec{i} + [\hat{L}_y,\hat{V}]\vec{j} + [\hat{L}_z,\hat{V}]\vec{k}$$

لنحسب $[\hat{L}_x,\hat{V}]$ فنجد :

$$[\hat{L}_x,\hat{V}] = [\hat{y}\hat{P}_z - \hat{z}\hat{P}_y, \hat{V}] = \hat{y}[\hat{P}_z,\hat{V}] - \hat{z}[\hat{P}_y,\hat{V}] = -\hat{y}\frac{\partial\hat{V}}{\partial z} + \hat{z}\frac{\partial\hat{V}}{\partial y}$$

ومنه :

$$[\hat{L}_x,\hat{V}] = \hat{y}\hat{F}_z - \hat{z}\hat{F}_y = \hat{M}_x$$

وكذلك نجد :

$$[\hat{L}_y,\hat{V}] = \hat{M}_y \quad , \quad [\hat{L}_z,\hat{V}] = \hat{M}_z$$

أي أن :

$$[\hat{L},\hat{V}] = -\hat{r}\times\nabla\hat{V} = \hat{M} \qquad (4.23)$$

حيث $\hat{M}$ موءثر عـزوم القوى الخارجية الموءثرة على الجسيم المقابل للعزم الكلاسيكي M، ويبدو بوضوح أنه اذا كان حقل القوى الـذي يتحرك فيه الجسيم ذا تناظر مركزي فان $[\hat{L},\hat{V}]=0$ وبالتالي فـان $[\hat{L},\hat{H}]=0$ ويكون L تكاملاً للحركة من وجهة نظر كلاسيكية . أما من وجهة نظر كوانتية فان تبادل الموءثرين $\hat{L}$ و $\hat{H}$ يعني امكانية وجود تابع خاص مشترك لهما (انظر الفصل الثالث) . فاذا علمنا أن $\hat{H}$ يتبادل مع $\hat{L}^2$ في هذه الحالة ويتبادل أيضاً مع $\hat{L}_z$ نستنتج عندئذ أنه لابد من وجود تابع خاص مشترك للموءثرات $\hat{H}$ ، $\hat{L}^2$ ، $\hat{L}_z$ ،

وسنبحث عن هذا التابع في الفصل التالي عند دراسة الحركة في حقل مركزي متناظر .

30 - طريقة ثانية لحساب مركبات العزم الحركي :

من المعلوم أن اختيار المحاور الاحداثية لايوءثر مطلقاً على الحالة الفيزيائية للجملة ولا على تنظيم التابع الموجي الذي يصفها ، ولهذا فان دوران المحاور الاحداثية يجب أن يقابله تحويل واحدي. لنحسب أولاً الموءثر المقابل لهذا التحويل ولهذا نأخذ التابع $\psi(x,y,z)$ الذي يصبح بعد الدوران $\psi'(x,y,z)$ ، واذا فرضنا أن الدوران يتم حول oz بزاوية φ فان تحويل الاحداثيات يكون بالشكل التالي :

$$x \to x\cos\varphi - y\sin\varphi \ , \ y \to x\sin\varphi + y\cos\varphi \ , \ z \to z$$

أما اذا تم الدوران بزاوية عنصرية $d\varphi$ فان التابع ψ يتحول التابع ψ' بحيث يكون :

$$\psi' = \psi(x - y\,d\varphi \,,\, x\,d\varphi + y \,,\, z) =$$

$$= \psi(x,y,z) + \frac{\partial\psi}{\partial x}(-y\,d\varphi) + \frac{\partial\psi}{\partial y}(x\,d\varphi) = \left[1 + \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)d\varphi\right]\psi$$

وحسب تعريف العزم الحركي يكون :

$$x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} = \frac{i}{\hbar}\hat{L}_z$$

أي أن :

$$\psi' = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\,d\varphi\right)\psi = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z d\varphi}\,\psi \qquad (4.24)$$

ومن الواضح أنه اذا دارت الجملة الاحداثية $(0\,x\,y\,z)$ بزاوية φ فاننا نجد :

$$\psi'(x,y,z) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\varphi}\,\psi(x,y,z) = \hat{U}^{+}\,\psi \qquad (4.25)$$

فالموءثر الواحدي المقابل لهذا التحويل الدوراني هو :

$$\hat{U}^{+} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\varphi} \qquad (4.26)$$

لنحسب الموءثر $\hat{L}_z$ بالاحداثيات الكروية ولهذا نفرض أن ψ تابع

لـ (r,θ,φ) ونستخدم العلاقات (4.3) . فاذا تم الدوران حول المحور Oz بزاوية عنصرية $\delta\alpha$ فان θ لن تتغير ، أما φ فتصبح $\varphi+\delta\alpha$ وهكذا يتحول ψ الى الشكل ψ' التالي :

$$\psi' = \psi(r,\theta,\varphi+\delta\alpha) = \psi + \delta\alpha\frac{\partial\psi}{\partial\varphi} = \left(1+\delta\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\psi \qquad (4.27)$$

فاذا قارنا العلاقة الأخيرة مع (4.24) بعد ملاحظة أن الدوران هنا بزاوية $\delta\alpha$ فاننا نجد :

$$\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z = \frac{\partial}{\partial\varphi} \Rightarrow \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \qquad (4.28)$$

وهي النتيجة نفسها التي توصلنا اليها سابقاً والمعبر عنها بالعلاقة (4.5) . لنحسب الآن كلاً من $\hat{L}_x$ و $\hat{L}_y$ ولهذا نفرض دورانا بزاوية $\delta\alpha$ حول المحور Ox يتحول فيه التابع ψ الى ψ' مع ملاحظة أن كلاً من φ و θ تتغير في هذا الدوران ويكون :

$$\psi' = \psi(r,\theta+d\theta,\varphi+d\varphi) = \psi(r,\theta,\varphi) + \delta\alpha\left(\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\frac{\partial\theta}{\partial\alpha} + \frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial\alpha}\right) \qquad (4.29)$$

وبما أن الدوران يتم حول Ox فان المقدار السابق يجب أن يساوي (قياساً بـ 4.24) :

$$\psi' = \left(1+\frac{i}{\hbar}\hat{L}_x\,\delta\alpha\right)\psi \qquad (4.30)$$

ولكي يتم الحصول على العبارة الصريحة لـ $\hat{L}_x$ يجب حساب المقدار ما بين القوسين في الطرف الأيمن من (4.29) ومقارنة ذلك مع (4.30). نلاحظ أولاً أن الدوران حول Ox لايغير من الاحداثي x ولكن y و z تتغيران طبقاً للعلاقة :

$$y' = y - z\,d\alpha \quad , \quad z' = z + y\,d\alpha \qquad (4.31)$$

نعوض عن y و z بقيمتيهما من علاقات التحويل بين الاحداثيات الديكارتية والكروية وعن y' و z' بقيمتيهما الناتجتين عن زيادة كل من θ بمقدار $d\theta$ و φ بمقدار $d\varphi$ وهكذا نجد :

$$y' = r\sin(\theta+d\theta)\sin(\varphi+d\varphi) = r\sin\theta\sin\varphi - r\cos\theta\,d\alpha \qquad (4.32)$$

$$z' = r\cos(\theta + d\theta) = r\cos\theta + r\sin\theta\sin\varphi\, d\alpha \qquad (4.33)$$

وبفك الأقواس في الطرف الأيسر والمقارنة مع الطرف الأيمن نجد من (4.33) :

$$r\cos\theta - r\sin\theta\, d\theta = r\cos\theta + r\sin\theta\sin\varphi\, d\alpha$$

ومنه :

$$\frac{d\theta}{d\alpha} = -\sin\varphi \qquad (4.34)$$

وينتج من (4.32) :

$$(r\sin\theta + r\cos\theta\, d\theta)(\sin\varphi + \cos\varphi\, d\varphi) = r\sin\theta\sin\varphi - r\cos\theta\, d\alpha$$

ومنه :

$$\sin\varphi\cos\theta\, d\theta + \cos\varphi\sin\theta\, d\varphi = -\cos\theta\, d\alpha$$

$$\sin\varphi\cos\theta\frac{d\theta}{d\alpha} + \cos\varphi\sin\theta\frac{d\varphi}{d\alpha} = -\cos\theta \qquad (4.35)$$

فاذا عوضنا $d\theta/d\alpha$ بقيمتها المحسوبة من (4.34) فاننا نجد قيمة $d\varphi/d\alpha$ التالية :

$$\frac{d\varphi}{d\alpha} = -\cot g\,\theta\cos\varphi \qquad (4.36)$$

نعوض أخيراً قيمتي $d\theta/d\alpha$ و $d\varphi/d\alpha$ المحسوبتين من (4.34) و (4.36) في (4.29) ونقارن النتيجة مع (4.30) فنحصل على المعادلة التالية :

$$\left(1 + \frac{i}{\hbar}\hat{L}_x\,\delta\alpha\right)\psi = \left[1 + \delta\alpha\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot g\,\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right]\psi$$

ومنه نجد عبارة $\hat{L}_x$ التالية :

$$\hat{L}_x = -\frac{\hbar}{i}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot g\,\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad (4.37)$$

وأخيراً لحساب $\hat{L}_y$ نأخذ دورانا حول المحور oy بزاوية $\delta\alpha$ يتغير فيه كل من φ و θ ونتبع الطريقة السابقة نفسها فنصل الى ما يلي :

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \quad (4.38)$$

وهي النتائج نفسها التي حصلنا عليها في القسم الأول من هذا الفصل.

لنحسب $\hat{L}^2$ استناداً الى العلاقات السابقة ولهذا نلاحظ أولاً أن :
$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ ، فاذا بدلنا $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2$ بقيمتها من (4.12) (بعد تعويض $[\hat{L}_x , \hat{L}_y]$ بقيمتها من (4.20a)) فاننا نجد :

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z \quad (4.39)$$

وكذلك نجد :

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z \quad (4.40)$$

وليس من الصعب الآن التعبير عن $\hat{L}^2$ في الاحداثيات بعد تعويض كل من $\hat{L}_+\hat{L}_-$ (أو $\hat{L}_-\hat{L}_+$) و $\hat{L}_z , \hat{L}_z^2$ بقيمها انطلاقاً من (4.5) و (4.15) حيث نحصل أخيراً على المؤثر $\hat{L}^2$ بالاحداثيات الكروية :

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right] \quad (4.41)$$

31 ـ حساب القيم الخاصة لموءثر العزم الحركي :

لنبرهن أولاً أن متوسط مربع أي موءثر هرميتي يجب أن يكون موجباً ، ولنأخذ على سبيل المثال الموءثر $\hat{L}^2$ (مربع العزم الحركي)

لدينا :

$$\hat{L}\psi = \lambda\psi \Rightarrow \hat{L}^2\psi = \hat{L}\lambda\psi = \lambda\hat{L}\psi = \lambda^2\psi$$

وهكذا تكون λ^2 هي القيمة الخاصة للموءثر $\hat{L}^2$ ، أما متوسط $\hat{L}^2$ فيساوي :

$$\langle\hat{L}^2\rangle = \int\psi^*\hat{L}^2\psi\,dx = \int\psi^*\hat{L}\hat{L}\psi\,dx = \int\psi^*\hat{L}\psi_1\,dx =$$

$$= \int\psi_1(\hat{L}\psi)^*dx = \int|\psi_1|^2dx = \|\psi_1\| \geqslant 0 \quad (4.42)$$

ومن جهة ثانية لدينا :

$$\langle \hat{L}^2 \rangle = \int \psi^* \hat{L}^2 \psi \, dx = \lambda^2 \int \psi^* \psi \, dx = \lambda^2$$

أي أن :

$$\langle \hat{L}^2 \rangle = \lambda^2 = \| \psi \| \geqslant 0$$

(4.43) نلاحظ أولاً أن $\hat{L}^2$ للموءثر الخاصة والتوابع الخاصة القيم لحساب مركباته لاتتبادل فيما بينها وبالتالي لايمكن اختيارها تابع خاص مشترك لها جميعا .

وبما أن $\hat{L}^2$ تتبادل مع كل من مركبات $\hat{L}$ فيمكن اختيار تابع خاص مشترك $\hat{L}^2$ واحدى مركباته ، وليكن $\hat{L}_z$ (مع العلم أن اختيارنا لـ $\hat{L}_z$ لايبنى على أساس وكان من الممكن حساب التوابع الخاصة بحيث تكون مشتركة لكل من $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_x$ أو $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_y$) .

نستخدم رموز ديراك ونرمز للتابع الخاص المشترك المطلوب حسابه بالرمز $|\, l,m \rangle \equiv \psi_{lm}$ وعندئذ يكون :

$$\left.\begin{aligned} \hat{L}^2 |\, l,m \rangle &= \lambda^2 |\, l,m \rangle = \hbar^2 l(l+1) |\, l,m \rangle \\ \hat{L}_z |\, l,m \rangle &= \hbar m |\, l,m \rangle \end{aligned}\right\} \quad (4.44)$$

حيث l و m هما ثابتان قيد التعيين . لنأخذ الآن الموءثرين L_- و L_+ حيث :

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i \hat{L}_y \quad , \quad (\hat{L}_-)^+ = \hat{L}_x + i \hat{L}_y = \hat{L}_+$$

ولنحسب عنصر المصفوفة :

$$\langle l,m |\, \hat{L}_- \hat{L}_+ \,| l,m \rangle = \int \psi_{lm}^* \hat{L}_- \hat{L}_+ \psi_{lm} \, dx =$$

$$= \int \hat{L}_+ \psi_{lm} (\hat{L}_-^+ \psi_{lm})^* dx = \int |\hat{L}_+ \psi_{lm}|^2 dx = \| \hat{L}_+ \psi_{lm} \| \geqslant 0 \quad (4.45)$$

وبنفس الطريقة نجد :

$$\langle l,m |\, \hat{L}_+ \hat{L}_- \,| l,m \rangle = \| \hat{L}_- \psi_{lm} \| \geqslant 0 \quad (4.46)$$

فاذا عوضنا عن $\hat{L}_-\hat{L}_+$ و $\hat{L}_+\hat{L}_-$ بقيمتيهما بدلالة $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ طبقـــا لـ (4.39) و (4.40) فاننا نجد العلاقتين التاليتين :

$$\langle l,m|\hat{L}_+\hat{L}_-|l,m\rangle = \langle l,m|\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z|l,m\rangle = \hbar^2[l(l+1) - m(m-1)]\langle l,m|l,m\rangle \quad (4.47a)$$

ومنه نجد طبقاً لـ (4.46) أن :

$$(l+\tfrac{1}{2})^2 \geqslant (m-\tfrac{1}{2})^2 \quad (4.48a)$$

وكذلك نجـــد :

$$\langle l,m|\hat{L}_-\hat{L}_+|l,m\rangle = \langle l,m|\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z|l,m\rangle = \hbar^2[l(l+1) - m(m+1)]\langle l,m|l,m\rangle \quad (4.47b)$$

وطبقاً لـ (4.45) تكون :

$$(l+\tfrac{1}{2})^2 \geqslant (m+\tfrac{1}{2})^2 \quad (4.48b)$$

أما من (4.48a) فنلاحظ أنها تعطي :

$$l^2+l > m^2-m \Rightarrow l \geqslant -m \Rightarrow m \leqslant -l \quad (4.49)$$

ومن (4.48b) و (4.49) نستنتج النتيجة الهامة التالية :

$$-l \leqslant m \leqslant +l \quad (4.50)$$

لنحسب الآن القيم الخاصة للموءثرين $\hat{L}_+$ و $\hat{L}_-$ انطلاقاً من العلاقـــات التبادلية التي يحققها هذين الموءثرين فنجد طبقاً لـ(4.21) العلاقتين :

$$\hat{L}_z\hat{L}_\pm - \hat{L}_\pm\hat{L}_z = \pm\hbar\hat{L}_\pm \quad (4.51)$$

فاذا استخدمنا العلاقة الثانية وأثرنا بطرفيها على التابـــع ψ_{lm} فاننا نجد :

$$\hat{L}_z\hat{L}_-|l,m\rangle - \hat{L}_-\hat{L}_z|l,m\rangle = -\hbar L_-|l,m\rangle$$

ومنـه :

$$\hat{L}_z\hat{L}_-|l,m\rangle = \hbar m\hat{L}_-|l,m\rangle - \hbar\hat{L}_-|l,m\rangle = \hbar(m-1)|l,m\rangle$$

وهذا يعني أنه عند تأثير $\hat{L}_-$ على $|l,m\rangle$ فانه يعطي قيمة خاصة أقل بواحد، ومن الطبيعي والحالة هذه أن نفرض أن $|l,m\rangle$ يتعلق بالتابع الخاص المقابل لهذه القيمة الخاصة أي :

$$\hat{L}_- |l,m\rangle = c\,|l,m-1\rangle \tag{4.52}$$

بفرض أن كلا $|l,m-1\rangle$ و $|l,m\rangle$ منظمان على الواحد .

أما اذا أثرنا بالموءثر الأول من (4.51) على $|l,m\rangle$ فاننا نجد بالطريقة نفسها :

$$\hat{L}_+ |l,m\rangle = c'\,|l,m+1\rangle \tag{4.53}$$

ولحساب كل من c و c' نستفيد من العلاقات (4.45) و (4.46) و (4.47a) و (4.47b) حيث نجد :

$$\int (\hat{L}_- \psi_{lm})^* (L_- \psi_{lm})\, dx = |c|^2 = \hbar^2 [\,l(l+1) - m(m-1)\,]$$

ومنه باختيار طور مناسب لِ c يجعل الطرف الأيمن موجباً يكون :

$$c = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \tag{4.54}$$

وبالطريقة نفسها نجد c' حيث نحصل على العلاقة :

$$c' = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \tag{4.55}$$

وبتبديل كل من c و c' بقيمتها من (4.54) و (4.55) في (4.52) و (4.53) على الترتيب نحصل على القيم الخاصة لكل من الموءثرين $\hat{L}_-$ و $\hat{L}_+$ حيث نجد :

$$\hat{L}_- |l,m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\; |l,m-1\rangle \tag{4.56}$$

$$\hat{L}_+ |l,m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\; |l,m+1\rangle \tag{4.57}$$

أي أن $\hat{L}_-$ بتأثيره على التابع $|l,m\rangle \equiv \psi_{lm}$ ينقله الى التابع الذي قبله بحيث ننتقل من m الى $m-1$ ولكن ذلك لايمكن أن يستمر

لأن m محدودة من الأدنى بـ lـ طبقاً لـ (4.55) . وبالفعل نلاحظ من (4.56) أنه عندما $m=-l$ فان $\hat{L}_-|l,-l\rangle = 0$.
أما المؤثر $\hat{L}_+$ فهو ينقل التابع $|l,m\rangle$ الى التابع $|l,m+1\rangle$ عند تأثيره عليه وبما أن m محدودة أيضا من الأعلى فلايمكن أن تستمر هذه الزيادة ولا بد أن ينعدم $\hat{L}_+|l,m\rangle$، وهذا بالفعل ما يحصل عندما $m=l$ حيث نجد مباشرة من (4.57) أن $\hat{L}_+|l,l\rangle = 0$. وهكذا نستنتج أن m يمكن أن تاخذ القيم التالية :

$$m = -l, -l+1, \ldots, 0, 1, 2, \ldots, l \qquad (4.58)$$

التي عددها ($2l+1$) قيمة وحتى يكون هذا العدد صحيحاً يجب أن يكون l صحيحاً أو نصف صحيح أي أن l يمكن أن ياخذ القيم التالية :

$$l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots \qquad (4.59)$$

مع العلم أنه يقابل كل قيمة لـ l عدد من القيم ناخذها m تساوي $(2l+1)$ قيمة . فمثلاً عندما تاخذ l القيمة صفر فان m تأخذ القيمة صفر أيضاً وتسمى الحالة الكوانتية عندئذ بالحالة S، أما اذا كان $l=1$ فان m يمكن أن ياخذ القيم $-1, 0, +1$ وتسمى هذه الحالة والحالة P ... وهكذا ... وتكون التسمية طبقاً للجدول التالي :

$$\left.\begin{array}{lcccccc} l = & 0 & 1 & 2 & 3 & 5 & \ldots \\ \text{(State) الحالة :} & S & P & d & f & g & \ldots \end{array}\right\} \qquad (4.60)$$

32 - التوابع الخاصة لموءثر العزم الحركي ، المتوافقات الكروية :

آ ـ لنحسب أولاً التابع الخاص Φ المقابل للموءثر $\hat{L}_z$ انطلاقاً من تعريفه (4.5) فنجد :

$$\hat{L}_z \Phi = \hbar m \Phi \Rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{d\Phi}{d\varphi} = \hbar m \Phi \qquad (4.61)$$

ومنـــــه :

$$\frac{d\Phi}{\Phi} = i\,m\,d\varphi \Rightarrow \Phi(\varphi) = c\,e^{im\varphi}$$

ومن الواضح أن التابع Φ يجب أن يكون دورياً ولهذا لابد أن ياخذ التعيين نفسه عندما تزداد φ بمقدار 2π أي أن :

$$e^{im(\varphi+2\pi)} = e^{im\varphi} \Rightarrow e^{im2\pi} = 1$$

ولكي تتحقق العلاقة الأخيرة نفسها يجب أن يكون m عدداً صحيحاً موجباً او سالباً ($m \in \mathbb{Z}$) وهي النتيجة نفسها (4.58) التي توصلنا اليها بطريقة ثانية .

لحساب c نستفيد من شرط التنظيم :

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = 1 \Rightarrow c^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = 1 \Rightarrow c = 1/\sqrt{2\pi}$$

أي أن التابع الخاص المنظم للمؤثر $\hat{L}_z$ هو التالي :

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{im\varphi} \qquad (4.62)$$

ب ـ لنبحث عن التابع الخاص المتعلق بـ θ ولهذا ننطلق من (4.56) فنضعها بالشكل :

$$\hat{L}_-|l,m\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\,|l,m-1\rangle = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,|l,m-1\rangle$$

فاذا وضعنا $m=l$ فاننا نجد من العلاقة السابقة :

$$\hat{L}_-|l,l\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1)-l(l-1)}\,|l,l-1\rangle = \hbar\sqrt{2l}\,|l,l-1\rangle \qquad (4.63)$$

وبالطريقة نفسها نجد :

$$\left.\begin{aligned} \hat{L}_-|l,l-1\rangle &= \hbar\sqrt{(2l-1)\,2}\,|l,l-2\rangle \\ \hat{L}_-|l,l-2\rangle &= \hbar\sqrt{(2l-2)\,3}\,|l,l-3\rangle \end{aligned}\right\} \qquad (4.64)$$

فاذا أثرنا عدة مرات بـ $\hat{L}_-$ على طرفي العلاقات السابقة فاننا نجد أخيراً دون صعوبة :

$$(\hat{L}_-)^k |l,l\rangle = \sqrt{\frac{k!\, 2l!}{(2l-k)!}}\; |l, l-k\rangle \qquad (4.65)$$

واذا فرضنا $l-k=m$ (عندما $k=0$ يكون $l=m$) فاننا نحصل على عبارة $|l,m\rangle \equiv \psi_{lm}$ التالية :

$$\psi_{lm} \equiv |l,m\rangle = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!\; 2l!}}\; (\hat{L}_-)^{l-m}\; \psi_{ll} \qquad (4.66)$$

ولحساب ψ_{ll} نفسها ، التي تحسب منها كافة التوابع بالتتالي،نجري التحويل التالي :

$$\psi_{ll} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\; e^{i\varphi}\; \Theta_{ll}(\theta) \qquad (4.67)$$

فاذا علمنا أن $\hat{L}_+ \psi_{lm} = 0$ عندما $l=m$ (لأن m لايمكن أن تتجاوز l) وبدلنا $\hat{L}_+$ بقيمتها من (4.9) و ψ_{ll} بقيمتها طبقاً لِ (4.67) فاننا نجد :

$$\hbar e^{i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot g\, \theta \frac{\partial}{\partial\varphi}\right) e^{il\varphi}\, \Theta_{ll}(\theta) = 0 \qquad (4.68)$$

ومنه نجد :

$$\frac{d\Theta_{ll}}{\Theta_{ll}} = l \cot g\, \theta\, d\theta$$

وبالاستكمال نجد :

$$\Theta_{ll} = A \sin^l \theta \qquad (4.69)$$

حيث A ثابت تنظيم يحسب طبقاً للعلاقة :

$$\int_0^\pi \Theta^*_{ll}(\theta)\, \Theta_{ll}(\theta) \sin\theta\, d\theta = 1 \Rightarrow A^2 \int_0^\pi \sin^{2l}_\theta\; \sin\theta\; d\theta = 1$$

وبفرض $x = \cos\theta$ فان التكامل السابق يتحول الى الشكل :

$$A^2 \int (1-x^2)^l\, dx = A^2 \frac{(l!)^2 2^{2l+1}}{(2l+1)!} = 1$$

ومنه نحصل على الثابت A :

$$A = \frac{\sqrt{(2\ell+1)!}}{\ell!\, 2^{\ell} \sqrt{2}}$$

(4.70)

اذا ضربنا A بمضروب

ولا تتغير النتيجة من الناحية الفيزيائية

طوري $(-1)^{\ell}$ ثم عوضنا في (4.69) حيث نجد أخيرا التابع $\Theta_{\ell\ell}$:

$$\Theta_{\ell\ell} \equiv |\ell,\ell\rangle = \frac{(-1)^{\ell}}{2^{\ell}\ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{2}} \sin^{\ell}\theta$$

(4.71)

ومن السهل ، الآن حساب كافة التوابع $\Psi_{\ell m}$ بتطبيق العلاقة التكرارية

(4.66) بالتالي انطلاقاً من (4.71) حيث نحصل أخيراً على

ما يسمى المتوافقات الكروية (التوابع الكروية

Spherical funtions) التي نرمز لها بالرمز $Y_{\ell}^{m}(\theta,\varphi)$

والتي توضع بالشكل :

$$Y_{\ell}^{m}(\theta,\varphi) \equiv |\ell,m\rangle = \Theta_{\ell m}\Phi_m = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!}}\, P_{\ell}^{m}(x)\, e^{im\varphi} \quad (4.72)$$

حيث $P_{\ell}^{m}(x)$ هي ما يسمى كثير حدود ليجاندر الموحد (Legendre's

asseosiated polynomial) التي تعطى بالعلاقة :

$$P_{\ell}^{m}(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} \left[\frac{(x^2-1)^{\ell}}{2^{\ell}\ell!}\right] ; (x=\cos\theta) \quad (4.73)$$

وسنرى في الفصل القادم أن $Y_{\ell}^{m}(\theta,\varphi)$ هو التابع الخاص للقسم الزاوي

من موءثر لابلاس المعبر عنه بالاحداثيات الكروية .

33 – القيم الخاصة لموءثر الانعكاس :

يعرف موءثر الانعكاس بالعلاقة :

(4.74)

$$\hat{P}\,\Psi(x,y,z) = \Psi(-x,-y,-z)$$

أي أن تأثير هذا الموءثر ينحصر في عكس اشارات الاحداثيات ، وهذا

يكافئ البحث عن نظير النقطة $M(x,y,z)$ بالنسبة للمبدأ ودراسة

ماذا يحدث للتابع الموجي $\Psi(x,y,z)$ نتيجة لذلك، شكل (4.1)،

أما اذا عبرنا عن التابع ψ بالاحداثيات الكروية (r, θ, φ) فان تعريف الموءثر $\hat{P}$ يعطى بالعلاقة :

$$\hat{P}\,\psi(r,\theta,\varphi) = \psi(r, \pi-\theta, \pi+\varphi) \tag{4.75}$$

لنختبر التابع الذي عُبر عن قسمه الزاوي بالعلاقة (4.72) :

$$\hat{P}\,\psi(r,\theta,\varphi) = \hat{P}\, c\, f(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi) = c\, f(r)\, P_l^m(-\cos\theta)\, e^{im(\pi+\varphi)}$$

وطبقاً لِ (4.73) يتغير P_l^m عندما نبدل $\cos\theta$ ب $\cos(\pi-\theta)$ حسب العلاقة :

$$P_l^m(-\cos\theta) = (-1)^{l+m}\, P_l^m(\cos\theta)$$

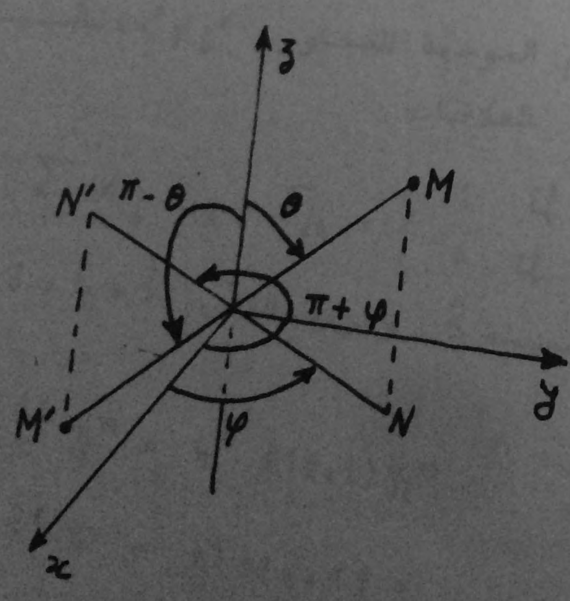
أما التابع المتعلق بالزاوية φ فيتحول الى الشكل :

$$\Phi(\varphi+\pi) = e^{im(\varphi+\pi)} = e^{im\pi}\, e^{im\varphi} = (-1)^m\, \Phi(\varphi)$$

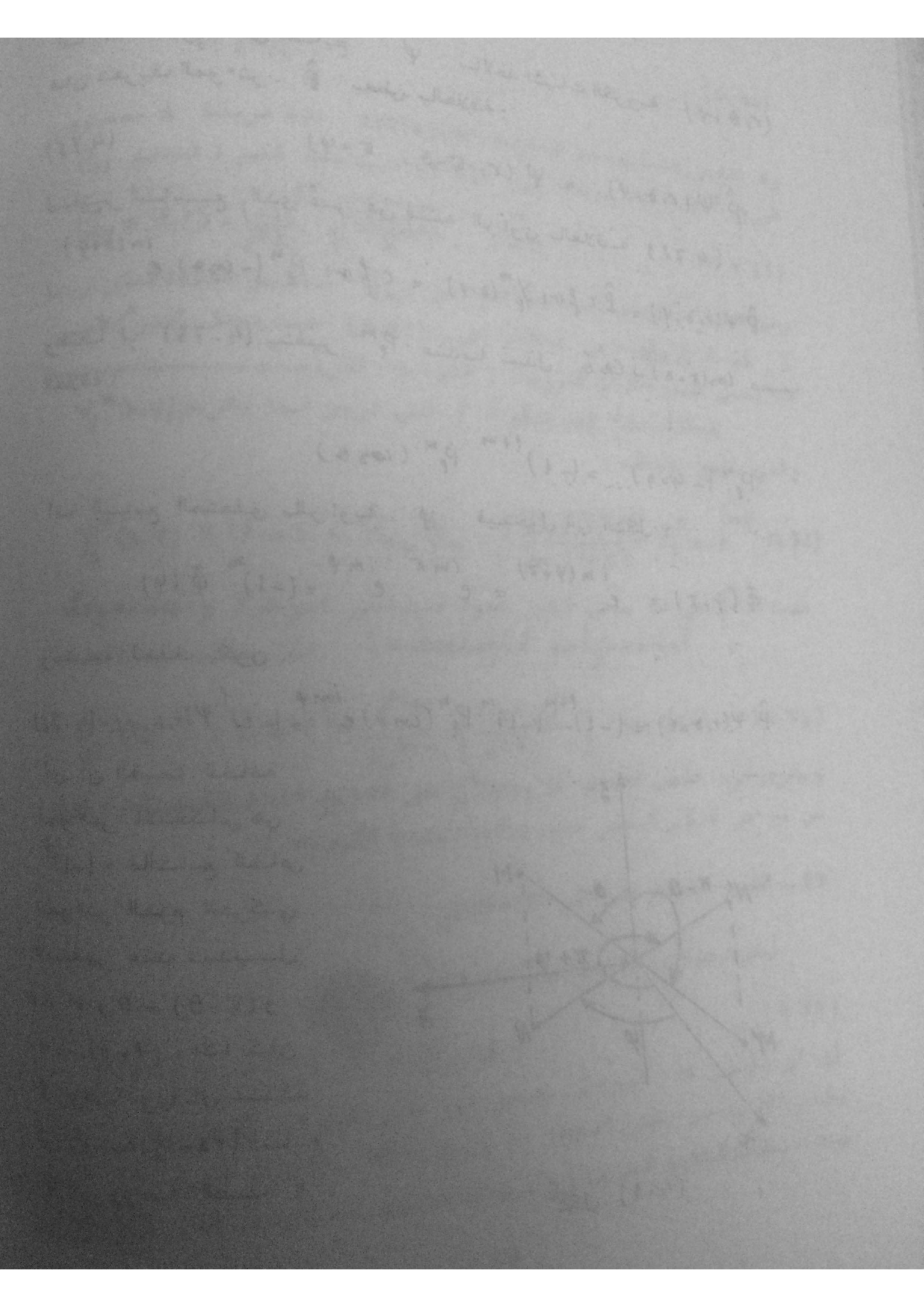
ونتيجة لذلك يكون :

$$\hat{P}\,\psi(r,\theta,\varphi) = (-1)^{l+m}(-1)^m\, P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi} = (-1)^l\, \psi(r,\theta,\varphi) \tag{4.76}$$

أي أن القيمة الخاصة لموءثر الانعكاس هي $(-1)^l$. فالتابع الخاص لموءثر العزم الحركي لايتغير عند تبديل r ب r و θ ب $(\pi-\theta)$ و φ ب $(\varphi+\pi)$ ، اذا كان l زوجيا ويقال عندئذ أن زوجية (Parity) التابع ψ هي زوجية العدد l نفسها .



شكل (4.1)



مسائل الفصل الرابع

١ ـ من المعلوم أن موءشر السبين $\hat{S}$ يحقق علاقات تبادلية مشابهة لما يحققه الموءشر $\hat{L}$ وبصورة خاصة لدينا :

$$[\hat{S}_i , \hat{S}_j] = i\hbar\, \delta_{ijk}\, \hat{S}_k$$

فاذا علمت أيضا أن موءشر العزم الكلّي يعطى بالعلاقة :

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$$

فاحسب المبدلات :

$$[J_i , J_j] : (i, j = 1, 2, 3).$$

٢ ـ برهن أن العلاقات التبادلية $(4.19\,a)$ تبقى محققة عند دوران المحاور الاحداثية في الفراغ بزاوية ما بحيث يتحول $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ ، $\hat{L}_z$ الى $\hat{L}'_x$ ، $\hat{L}'_y$ ، $\hat{L}'_z$ ، طبقاً للعلاقات :

$$\hat{L}'_x = \alpha_{11}\hat{L}_x + \alpha_{12}\hat{L}_y + \alpha_{13}\hat{L}_z$$

$$\hat{L}'_y = \alpha_{21}\hat{L}_x + \alpha_{22}\hat{L}_y + \alpha_{23}\hat{L}_z$$

$$\hat{L}'_z = \alpha_{31}\hat{L}_x + \alpha_{32}\hat{L}_y + \alpha_{33}\hat{L}_z$$

حيث أن α_{ij} هي جيوب التمام الموجهة للمحاور $ox'y'z'$ بالنسبة للمحاور $oxyz$ وهي تحقق العلاقات :

$$\sum_i \alpha_{ij}\alpha_{ik} = \delta_{jk} = \begin{cases} 1 & \text{if } j = k \\ 0 & \text{if } j \neq k \end{cases}$$

٣ ـ جسيم عزمه المداري $\hat{L}$ وسبينه $\hat{S}$ وعزمه الكلّي $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$

نفرض أن :

$$\hat{L}^2 Y_l^m = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m \quad , \quad \hat{L}_z Y_l^m = \hbar m . Y_l^m$$

$$\hat{S}^2 \chi = \hbar^2 s(s+1)\chi \quad , \quad \hat{S}_z \chi = \hbar m_s \chi$$

حيث χ ، Y_l^m هي التوابع الخاصة لموءشري العزم الحركي والسبين

على الترتيب .

$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ الكلي العزم لموءثر الخاصة التوابع احسب — آ

اذا علمت أن : $s = 1/2$.

ب — كيف تحسب القيم الخاصة للموءثرات التاليه :

$\hat{J}\hat{S}$, $\hat{L}\hat{S}$, $\hat{J}\hat{L}$.

4 — ليكن الموءثر $\hat{L}_x$ الذي يحقق العلاقة $\hat{L}_x \psi = 0$ في الحالة P $(l = 1)$.

آ — احسب التابع الخاص لهذا الموءثر

ب — هل يمكن أن يكون للموءثرين $\hat{L}_y$ ، $\hat{L}_z$ التابع الخاص نفسه الذي حسبته في الطلب الأول ؟ ولماذا ؟

5 — احسب القيمة الخاصة لموءثر هاملتون لدوّامة متناظرة اذا علمت أن طاقتها الكلاسيكية تعطى بالعلاقة :

$$E = \frac{1}{2I_x}\left[\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2\right] + \frac{1}{2I_z}\hat{L}_z^2$$

حيث $\hat{L}$ العزم الحركي للدوامة حول O (مركز الاحداثيات)، I_x ، I_y ، I_z ، هي عزوم العطالة حول المحاور الأساسية للدوامة .

6 — احسب المبدلات :

$$[\hat{L}_z , \hat{L}_x^2] , [\hat{L}_z , \hat{L}_x\hat{L}_y] , [\hat{L}_z , \hat{V}(x)]$$

حيث $V(x)$ هو موءثر الكمون .

7 — اذا علمت أن $\hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$ فبرهن صحة العلاقة :

$$\langle \hat{L}_x \rangle = \langle \hat{L}_y \rangle = 0$$

8 — احسب انطلاقاً من العلاقات التي رأيتها في هذا الفصل التوابع الكروية المقابلة لـ $l = 0, 1, 2, 3$، وبرهن أنك تحصل على مايلي:

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} , \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta , \quad Y_1^{\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi} ,$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1) , \quad Y_2^{\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{\pm i\varphi} ,$$

$$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\, e^{\pm 2i\varphi} , \quad Y_3^0 = \sqrt{\frac{7}{16\pi}}\cos\theta(5\cos^2\theta - 3) ,$$

$$Y_3^{\pm 1} = \sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin\theta (5\cos^2\theta - 1) e^{\pm i\varphi}, \quad Y_3^{\pm 2} = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2\theta \cos\theta \, e^{\pm 2i\varphi}$$

$$Y_3^{\pm 3} = \sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3\theta \, e^{\pm 3i\varphi}.$$

9 ـ احسب المساقط الديكارتية للاندفاع $\hat{P}$ ولمساقط عزم الاندفاع $\hat{L}$ في الاحداثيات الكروية انطلاقا من العلاقات :

$$r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}, \quad \theta = \arccos \frac{z}{r},$$

$$\varphi = \operatorname{arctg} \frac{y}{x}.$$

10 ـ جملة كوانتية موءلفة من جسيمين . برهن أنه من الممكن ، في آن واحد ، قياس احدى المجموعتين :

$$\{\hat{L}_1^2, \hat{L}_{1z}, \hat{L}_2^2, \hat{L}_{2z}\}, \quad \{\hat{L}_1^2, \hat{L}_2^2, \hat{L}^2, L_z\}$$

وذلك باهمال التأثير المتبادل بين الجسيمين .

11 ـ ليكن الموءثر $\hat{M}$ الموءلف من جداء المركبتين $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ بالشكل التالي :

$$\hat{M} = \frac{1}{2}(\hat{L}_x \hat{L}_y + \hat{L}_y \hat{L}_x)$$

آ ـ برهن أن $\hat{M}$ هرميتي .

ب ـ احسب القيمة الوسطى للموءثر $\hat{M}$.

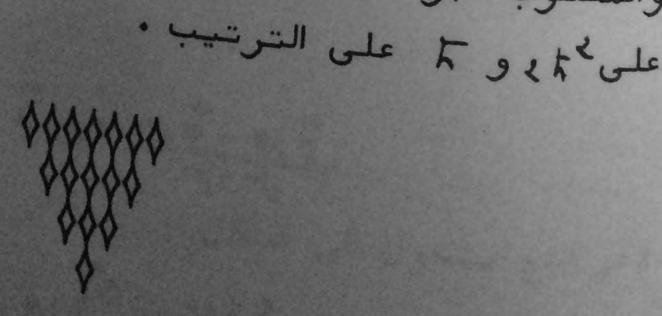
ج ـ احسب القيمة الوسطى لمربع هذا الموءثر .

توجيه : استفد من الموءثرين $\hat{L}_+$ ، $\hat{L}_-$.

12 ـ يعطى التابع الموجي لجسيم يتحرك في حفرة كمون كروية في لحظة ما بالشكل :

$$\psi = (x+y+z)\, e^{-\alpha\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$$

والمطلوب البرهان أنه عند قياس $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ فاننا نحصل على $2\hbar^2$ و $\hbar$ على الترتيب .



الفصل الخامس

الحركة في حقل مركزي متناظر

34- معادلة شرودنغر :

من المعلوم في الميكانيك الكلاسيكي أن حركة جملة مادية مؤلفة من جسيمين معينين بالاحداثيين $\vec{r}_1$ و $\vec{r}_2$ يتفاعلان بواسطة الكمون $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|)$ ، تؤول الى حركة جسيم واحد كما في حقل مركزي متناظر . ولبرهان ذلك نكتب تابع لاغرانج لهذه الجملة :

$$\mathcal{L} = T - V = \frac{1}{2} m_1 \dot{\vec{r}}_1^{\,2} + \frac{1}{2} m_2 \dot{\vec{r}}_2^{\,2} - V(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) \qquad (5.1)$$

فاذا استعضنا عن الاحداثيين $\vec{r}_1$ و $\vec{r}_2$ باحداثيين جديدين طبقا للعلاقتين :

$$\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \quad , \quad \vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} \qquad (5.2)$$

فان تابع لاغرانج يتحول الى الشكل :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} M \dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2} \mu \dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r}) \qquad (5.3)$$

حيث μ و M هما الكتلة المختزلة ومجموع الكتلتين على الترتيب:

$$M = m_1 + m_2 \quad , \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \qquad (5.4)$$

أما تابع هاملتون لجملة الجسيمين فيحسب بسهولة حيث نجد أخيرا :

$$H = \sum_j P_j \dot{q}_j - \mathcal{L} = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + V(r) \qquad (5.5)$$

حيث $\vec{P}$ هي اندفاع مركز الكتلة ($\vec{P} = M.\dot{\vec{R}}$) و $\vec{p}$ هي الاندفـــاع النسبي ($\vec{p} = \mu \dot{\vec{r}}$) . وعند الانتقال الى ميكانيك الكم يتحول تابع هاملتون (5.5) الى موءثر هاملتون بعد أن يتحول الاندفاعـــان $\vec{P}$ و $\vec{p}$ الى موءثرين طبقا للعلاقتين :

$$\hat{P} = -i\hbar \nabla_R \quad , \quad \hat{p} = -i\hbar \nabla_r \qquad (5.6)$$

أما الشكل الصريح لموءثر هاملتون بدلالة الموءثرين السابقيـــــن وموءثر الكمون :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + \hat{V}(\vec{r}) \qquad (5.7)$$

ومعادلة شرودنـغر تكون :

$$\hat{H}\, \Psi(\vec{R},\vec{r}) = E\, \Psi(\vec{R},\vec{r}) \qquad (5.8)$$

وبما أن الموءثر $\hat{H}$ انقسم الى قسمين مستقلين : الأول تابـــع لاحداثيات مركز الكتلة $\vec{R}$ والثاني للاحداثي النسبي $\vec{r}$ فان التابع الموجي $\Psi(\vec{R},\vec{r})$ سينقسم الى جداء تابعين مستقلين همـــا $\psi(\vec{r})$ و $\varphi(\vec{R})$، حيث يصف الأول $\psi(\vec{r})$ حركة الكتلة المختزلة μ عندمـــا تتحرك في حقل كمون $V(\vec{r})$ ويصف الثاني الحركة الحرة لمركز الكتلـة (وذلك بفرض عدم وجود قوى خارجية توءثر على جملة الجسيمـــين)، هذا مع العلم أن التابعين $\varphi(\vec{R})$ و $\psi(\vec{r})$ يحققان المعادلتين :

$$\left.\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2\, \varphi(\vec{R}) &= E_R\, \varphi(\vec{R}) && (a) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + \hat{V}(\vec{r})\right] \psi(\vec{r}) &= E_r\, \psi(\vec{r}) && (b) \end{aligned}\right\} \qquad (5.9)$$

وفي الحالة الخاصة عندما تكون كتلة أحد الجسيمين أكبر بكثير من الثاني ($m_1 \gg m_2$ مثلا) فان الكتلة المختزلة μ تتحول الـى الكتلة m_2 طبقا للعلاقة :

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = m_2 / (m_1 + \frac{m_2}{m_1}) \simeq m_2 \equiv m \ , \ M \simeq m$$

ومن الواضح أن هذه الحالة تنطبق على الحركة في حقل مركزي متناظر

حيث نفرض أن وجود حقل متناظر $V(\vec{r})$ ناتج عن جسيم كتلته كبيرة (النواة مثلا) يتحرك ضمن هذا الحقل جسيم آخر كتلته صغيرة جدا بالنسبة للأول (الالكترون مثلا). أما معادلة شرودنغر (5.9b) فتتحول الى الشكل :

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(\vec{r})] \psi(r) = 0$$

(5.10)

ولحل هذه المعادلة لابد من حساب ∇^2 في الاحداثيات الكروية الذي يكون تابعا فقط $|\vec{r}|$، يمثل في هذه الحالة متجه موضع الجسيم ذي الكتلة $m_2 = m$، انطلاقا من مركز الجسيم ذي الكتلة الأكبر ، هذا المركز الذي يعتبر مركزا للاحداثيات .

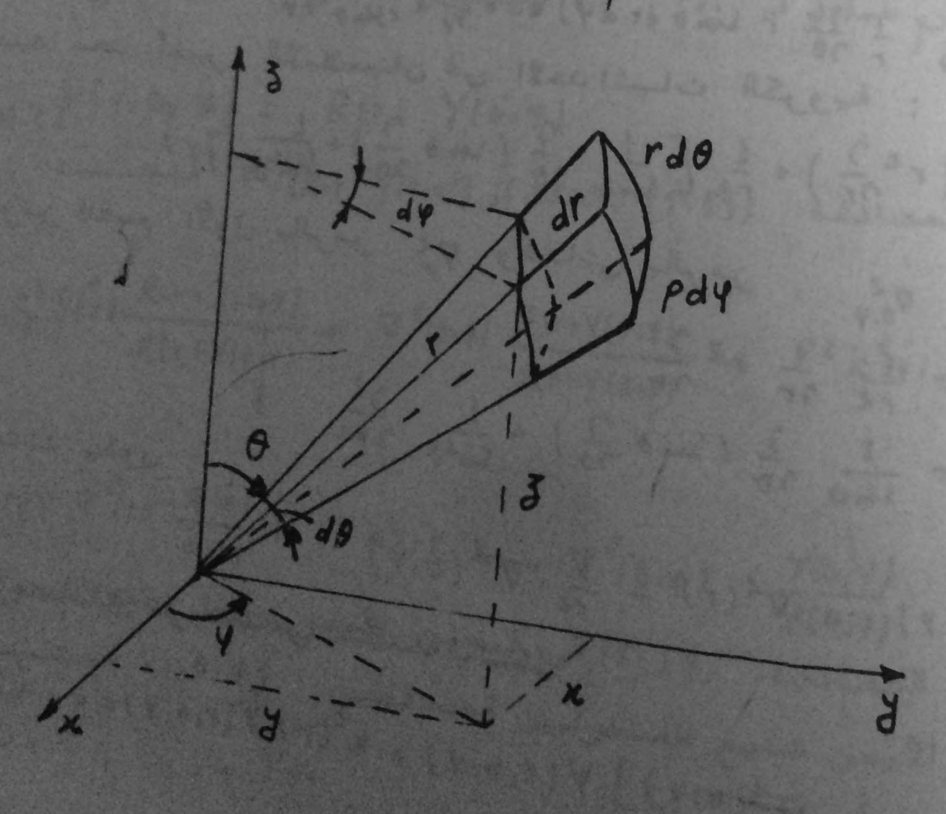
وفي الفقرة القادمة نحسب المؤثر ∇^2 .

35- حساب ∇^2 في الاحداثيات الكروية :

يحدد مكان النقطة المادية (الجسيم) في الاحداثيات الكروية بثلاثة وسطاء هي (r, θ, φ) كما في الشكل (5.1) أما عنصر الحجم dV فيساوي :

$$dV = r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\varphi$$

ولكتابة معادلة شرودنغر في الاحداثيات الكروية ينبغي حساب اللابلاسيان (المؤثر ∇^2) أولا ولذلك نكتب :



شكل (5.1)

$$\Delta\Psi \equiv \nabla^2\Psi = \text{div grad}\,\Psi = \text{div}\,\vec{B}$$

(5.11) حيث $\vec{B}$ هو متجه مركباته على المحاور الاحداثية القطبية الموافقة لـ (r,θ,φ) هي :

$$B_r = \frac{\partial\Psi}{\partial r}\ ,\ B_\theta = \frac{1}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\ ,\ B_\varphi = \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} \qquad (5.12)$$

ولحساب $\text{div}\,\vec{B}$ ننطلق من تعريف التدفق :

$$\text{div}\,\vec{B} = \lim_{S\to 0}\frac{\oint_S \vec{B}\cdot\vec{ds}}{dv} = \frac{1}{dv}\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}(B_i\, dS_i)\, dx_i \qquad (5.13)$$

حيث dS_i هي السطوح العنصرية الموضحة على الشكل (5.1) .
وهي تساوي على الترتيب :

$$\left.\begin{aligned} dS_r &= r^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi \\ dS_\theta &= r \sin\theta\, dr\, d\varphi \\ dS_\varphi &= r\, dr\, d\theta \end{aligned}\right\} \qquad (5.14)$$

فاذا بدلنا قيم B_i من (5.12) نجد :

$$\text{div}\,\vec{B} = \frac{1}{r^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi}\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\partial\Psi}{\partial r} r^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi\right) dr + \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} r\sin\theta\, dr\, d\varphi\right) d\theta + \frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\Psi}{\partial\varphi} r\, dr\, d\theta\right) d\varphi\right\} \qquad (5.15)$$

ومنه نجد أخيرا اللابلاسيان في الاحداثيات الكروية :

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \qquad (5.16)$$

لنرمز للقسم الأول بالرمز ∇_r^2 وللثاني بالرمز $\frac{1}{r^2}\nabla_{\theta,\varphi}^2$ أي :

$$\left.\begin{aligned} \nabla^2(r) &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2\frac{\partial}{\partial r} \\ \nabla^2(\theta,\varphi) &= \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \end{aligned}\right\} \qquad (5.17)$$

وعندئذ يكون :

$$\nabla^2(r,\theta,\varphi) = \nabla^2(r) + \frac{1}{r^2}\nabla^2(\theta,\varphi) \qquad (5.18)$$

أما معادلة شرودنغر فتكتب بالشكل :

$$\left[\nabla^2(r) + \frac{1}{r^2}\nabla^2(\theta,\varphi)\right]\Psi(r,\theta,\varphi) + k^2(r)\,\Psi(r,\theta,\varphi) = 0 \qquad (5.19)$$

حيث :

$$k^2(r) = \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(r)\right] \qquad (5.20)$$

وهو مقدار تابع لـ r فقط .

36 – حل معادلة شرودنغر بطريقة فصل التحولات :

ان معادلة شرودنغر (5.19) هي معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية حلها هو تابع ما للاحداثيات من الشكل $\psi(\vec{r}) = \psi(r,\theta,\varphi)$ (وسنجده فيما بعد) أما المقدار $|\psi(r,\theta,\varphi)|^2$ فيمثل احتمال وجود الجسيم في النقطة (r,θ,φ) من الفراغ . أما الشروط العامة التي يجب أن يحققها التابع الموجي من محدودية واستمرار ووحدانية تعيين فهي ما سيعطينا طاقة هذا الجسيم .

من الواضح أن الحل العام للمعادلة (5.19) هو تابع للكمون $V(r)$ الذي يخضع له الجسيم ، الا أنه ، بالرغم من عدم معرفة هذا الكمون، يمكن ايجاد الحل العام لهذه المعادلة ، المتعلق بالزاوتين θ , φ، ولذلك نتبع طريقة فصل المحولات .

ولنبحث عن الحل لمعادلة شرودنغر (5.19) بشكل جداء تابعين الأول تابع للمتحول r (القسم القطري) والثاني تابع للزاوتين θ , φ (القسم الزاوي) وهذا ممكن لأن الموءثر ∇^2 انقسم الى قسمين مستقلين طبقا لـ (5.18) فلنفرض ، اذن ، الحل العام من الشكل:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\, Y(\theta,\varphi) \qquad (5.21)$$

لنضرب طرفي المعادلة (5.19) بالمقدار $r^2/[R(r)\, Y(\theta,\varphi)]$ فنجد :

$$r^2 \nabla^2_{(r)} \frac{R(r)\, Y(\theta,\varphi)}{R(r)\, Y(\theta,\varphi)} + \nabla^2_{(\theta,\varphi)} \frac{R(r)\, Y(\theta,\varphi)}{R(r)\, Y(\theta,\varphi)} + r^2 k^2(r) \frac{R(r)\, Y(\theta,\varphi)}{R(r)\, Y(\theta,\varphi)} = 0$$

أو :

$$r^2 \nabla^2_{(r)} \frac{R(r)}{R(r)} + r^2 k^2(r) = - \nabla^2_{(\theta,\varphi)} \frac{Y(\theta,\varphi)}{Y(\theta,\varphi)} \qquad (5.22)$$

وهكذا تنقسم المعادلة (5.19) الى قسمين الأيسر منها تابع للمحول المستقل r والأيمن تابع للمتحولين المستقلين (θ,φ)، فحتى

تتحقق المساواة بينهما لابد أن يساوي كل منهما مقدارا ثابتا غير متعلق بالمتحولات (r, θ, φ) فليكن هذا المقدار λ وعندئذ نجد المعادلتين :

$$\frac{r^2 \nabla^2(r) R(r)}{R(r)} + r^2 k^2(r) = \lambda \Rightarrow [\nabla^2(r) + k^2 - (\lambda/r^2)] R(r) = 0 \quad (5.23)$$

$$-\frac{\nabla^2(\theta,\varphi) Y(\theta,\varphi)}{Y(\theta,\varphi)} = \lambda \quad \Rightarrow [\nabla^2(\theta,\varphi) + \lambda] \; Y(\theta,\varphi) = 0 \quad (5.24)$$

من الواضح أن المعادلة الأخيرة (5.24) لاتتعلق الا بالزاوتين θ، φ وبما أن الكمون في الحقل المركزي المتناظر تابع لـ r فقط فان (5.24) ستكون صحيحة لكل أنواع الحركة في الحقل المركزي، وسنبحث الآن عن الحل العام لهذه المعادلة طبقا لطريقة فصل المتحولات أيضا فنفرض هنا الحل من الشكل :

$$Y(\theta,\varphi) = \Theta(\theta) \; \Phi(\varphi) \quad (5.25)$$

ونكتب الموءثر $\nabla^2(\theta,\varphi)$ بالشكل :

$$\nabla^2(\theta,\varphi) = \nabla^2(\theta) + \frac{1}{\sin^2\theta} \nabla^2(\varphi) \quad (5.17a)$$

حيث :

$$\left.\begin{aligned} \nabla^2(\theta) &= \frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{d}{d\theta}\right) \\ \nabla^2(\varphi) &= \frac{d^2}{d\varphi^2} \end{aligned}\right\} \quad (5.26)$$

ثم نبدل ذلك في (5.24) ونقسمها على المقدار $\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ فنحصل على العلاقة :

$$\frac{\nabla^2(\theta)\,\Theta(\theta)}{\Theta(\theta)} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\nabla^2(\varphi)\,\Phi(\varphi)}{\Phi(\varphi)} + \lambda = 0$$

أو :

$$\sin^2\theta + \frac{\nabla^2(\theta)\,\Theta(\theta)}{\Theta(\theta)} + \lambda \sin^2\theta = -\frac{\nabla^2(\varphi)\,\Phi(\varphi)}{\Phi(\varphi)} \quad (5.27)$$

وهي مساواة بين طرفين كل منهما تابع لمتحول مستقل فلكي تتحقق هذه المساواة يجب أن يساوي كل من الطرفين قيمة ثابتة m^2 وعندئذ نحصل على المعادلتين :

$$\nabla^2(\theta)\,\Theta(\theta) + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta(\theta) = 0 \quad (5.28)$$

$$\nabla^2(\varphi)\,\Phi(\varphi) + m^2\,\Phi(\varphi) = 0 \quad (5.29)$$

وهكذا انقسمت معادلة شرودنغر (5.19) الى ثلاث معادلات مستقلة (5.23) ، (5.28) ، (5.29) . والحل العام للمعادلة (5.19) سيكون جداء التوابع الثلاثة المحققة للمعادلات المذكورة:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\ \Theta(\theta)\ \Phi(\varphi)$$

ولحساب ψ بشكله النهائي يجب دائما البدء بحل المعادلة الأخيرة (5.29) باعتبارها تحوي وسيطا واحدا m ثم نبدل قيمته في (5.28) ونحلها وبالتالي نجد التابع $Y(\theta,\varphi)$. أما لحساب $R(r)$ فلا بد من معرفة الكمون $V(r)$ وسندرس ذلك بالتفصيل فيما بعد . أما الآن فسنبحث في تنظيم التابع الموجي ψ ، والشرط العام لذلك، كما نعلم، هو أن يساوي الواحد احتمال وجود الجسيم في كل نقط الفراغ أي :

$$\int \psi^{*}\psi\, dV = 1$$

فاذا بدلنا كلا من ψ و dV بقيمتيهما نجد :

$$\int_0^{\infty} R^{*}(r)R(r)\,r^2 dr \int_0^{\pi} \Theta^{*}(\theta)\,\Theta(\theta)\,\sin\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} \Phi^{*}(\varphi)\,\Phi(\varphi)\, d\varphi = 1 \qquad (5.30)$$

وهذا يعني أنه من الممكن اجراء عملية التوحيد (التنظيم) كما يلي :

$$\int_0^{\infty} R^{*}(r)\,R(r)\,r^2 dr = 1 \qquad (5.31)$$

$$\int_0^{\pi} \Theta^{*}(\theta)\,\Theta(\theta)\,\sin\theta\, d\theta = 1 \qquad (5.32)$$

$$\int_0^{2\pi} \Phi^{*}(\varphi)\,\Phi(\varphi)\, d\varphi = 1 \qquad (5.33)$$

37- التوابع الموجبة الزاوية الخاصة ـ التوابع الكروية :

(Spherical Functions , Harmonique Spherique)

لنبدأ الآن بحل المعادلة (5.29) ولهذا نكتبها بالشكل :

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m^2\Phi = 0$$

وحلها يمكن أن يكتب بأحد شكلين :

$$\Phi = A\cos(m\varphi + \varphi_0) \qquad (5.34)$$

$$\Phi = c_1 e^{im\varphi} + c_2 e^{-im\varphi}$$

أو :

(5.35)

ومن الواضح أن لكل من الحلين معنى فيزائيا مختلفا عن الآخر : فالأول يعني أن الجسيم يتحرك بحركة اهتزازية حول مركز القوى (مركز الاحداثيات) ، أما الثاني فيعني أن الموجة المرافقة له تتحرك على دائرة بحيث يصنع نصف القطر المتجه (شعاع الموضع) الواصل من مركز القوى الى الجسيم المتحرك زاوية φ ، وسنختار هذه الحالة الأعم . أما القسم الثاني من هذا الحل فيمكن الحصول عليه من القسم الأول بتبديل m بـ $-m$ ولذلك وتسهيلا للعمل سنقتصر على القسم الأول منه ونعتبر أن m عدد جبري (موجب أو سالب) وبالتالي فالحل المطلوب يكتب بصورته النهائية بالشكل :

$$\Phi = c\, e^{im\varphi}$$

حيث c ثابت يتعين من شرط التنظيم (5.33) أي :

$$\int_0^{2\pi} c^* c\, e^{-im\varphi} e^{+im\varphi} d\varphi = c^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = 1$$

ومنه نجد $c = 1/\sqrt{2\pi}$ ، وعندئذ يكون :

(5.36)

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$$

ولحساب قيمة الثابت m نستفيد من وحدانية تعيين التابع الموجي التي تعني، فيزائيا، أن الجسيم الموصوف بتابع Ψ لايمكن أن يوجد في موضعين مختلفين بآن واحد . فلنطبق هذا على التابع الدوري Φ الذي يجب أن يأخذ التعيين نفسه من أجل الزاوية $\varphi' = \varphi + 2\pi$ أي :

(5.37)

$$\Phi(\varphi') = \Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$$

أي أن التابع Φ يجب أن يأخذ التعيين نفسه بعد اجراء دورة واحدة فاذا بدلنا في (5.36) نجد :

(5.38)

$$e^{im\varphi} = e^{im(\varphi+2\pi)} \Rightarrow e^{2im\pi} = 1$$

$e^{2im\pi} = \cos(2im\pi) + i\sin(2im\pi)$

وحتى تتحقق هذه المعادلة يجب أن تأخذ m القيم الصحيحة التالية :

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots \qquad (5.39)$$

حيث يسمى m : العدد الكمي المغناطيسي (Magnetic quantum number) (Nombre quantique magnétique).

ويمكن أخيراً من التأكد أن التوابع Φ_m تحقق الشرط (3.19) أي :

$$\int \Phi^*_{m'} \Phi_m \, d\varphi = \delta_{mm'}$$

وهي، كما رأينا، علاقة شبيهة بالجداء العددي لمتجهات الواحده في الفراغ العادي ، وسنرى أن التوابع $Y(\theta,\varphi)$ تحقق العلاقة نفسها ولهذا يمكن اعتبار هذه التوابع كمتجهات في فراغ هيلبرت وتطبق كل العمليات التي تجري على المتجهات في الفراغ العادي (x, y, z)، على التوابع الموجية في هذا الفراغ الجديد .

وبهذا نكون قد انتهينا من دراسة التابع Φ، وسنبحث عن المعنى الفيزيائي للعدد الكمي m بعد حل المعادلة (5.28) وحساب $\Theta(\theta)$، ولحلها نغير المتحول θ فنفرض متحولا جديدا $x = \cos\theta$ فنجد بعد ملاحظة أن:

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{d}{dx}\frac{dx}{d\theta} = -\sin\theta \frac{d}{dx} \qquad (5.40)$$

وأن $\nabla^2(\theta)$ يتحول الى الصيغة التالية :

$$\nabla^2(\theta)\Theta = \frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{d}{d\theta}\right)\Theta =$$

$$= -\frac{\sin\theta}{\sin\theta}\frac{d}{dx}\left[\sin\theta(-\sin\theta)\frac{d}{dx}\Theta\right] = \left[(1-x^2)\Theta'_x\right]' \qquad (5.41)$$

وبالتبديل في المعادلة (5.28) نجد أخيرا :

$$\left[(1-x^2)\Theta'\right]' + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta = 0 \qquad (5.28a)$$

ولهذه المعادلة نقطة شاذة هي $x = \pm 1$ ، وحتى نتخلص من الشذوذ نبحث عن حل لها من الشكل :

$$\Theta(x) = (1-x^2)^{s/2} u(x) \qquad (5.42)$$

نشتق فنجد :

$$\Theta'(x) = -s\,x(1-x^2)^{s/2-1} u(x) + (1-x^2)^{s/2} u'(x)$$

$\Theta'(x) = -Sx(1-x^2)^{\frac{S}{2}-1} u(x) + (1-x^2)^{\frac{S}{2}} u'(x)$

نضرب هذه المعادلة بـ ($1-x^2$) ثم نحسب المقدار $[(1-x^2)\Theta']'$

فنحصل على المعادلة :

$$[(1-x^2)\Theta']' = -S(1-x^2)^{S/2} u + S^2 x^2 (1-x^2)^{S/2-1} u - Sx(1-x^2)^{S/2} u' + - 2\left(\frac{S}{2}+1\right) x (1-x^2)^{S/2} u' + (1-x^2)^{S/2+1} u''$$

فاذا لاحظنا أن :

$$\frac{S^2 x^2}{1-x^2} = \frac{S^2(x^2-1)}{1-x^2} + \frac{S^2}{1-x^2} = -S^2 + \frac{S^2}{1-x^2}$$

ثم بدلنا في (5.28a) فاننا نجد المعادلة التالية :

$$(1-x^2)u'' - 2x(1+S)u' + \left(\lambda - S^2 - S + \frac{S^2-m^2}{1-x^2}\right)u = 0 \qquad (5.43)$$

وهنا نتجنب النقطة الشاذة عندما $x \to 1$ بأن نفرض $S = \pm m$

وهذا ممكن باعتبار أن الثابت S اختياري .

وبما أن المعادلة (5.43) تتبع (m^2) (وليس m) فان الحلين الموافقين للقيمتين m و $-m$ سيكونان متكافئين ويمكن الحصول على أحدهما من الآخر بتبديل m بـ $-m$ أي :

$$\Theta(m) = A\,\Theta(-m) \qquad (5.44)$$

لنبحث أولا عن الحلول التي توافق m الموجبة أي $m = S \geq 0$

وعندئذ نكتب المعادلة (5.43) بالشكل :

$$(1-x^2)u'' - 2x(m+1)u' + [\lambda - m(m+1)]u = 0 \qquad (5.45)$$

ولحل هذه المعادلة الأخيرة التي لا تحوي أي شذوذ نتبع طريقة السلاسل فنفرض أن الحل بشكل سلسلة :

$$u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k \qquad (5.46)$$

نشتق ونبدل فنجد :

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\{ k(k-1)a_k x^{k-2} + a_k[\lambda - (k+m)(k+m+1)]x^k \right\} = 0$$

فاذا عزلنا الحدود من المرتبة k نجد :

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\{ (k+2)(k+1)a_{k+2} + [\lambda - (k+m)(k+m+1)]a_k \right\} x^k = 0 \qquad (5.47)$$

ومنه تنتج العلاقة التكرارية :

$$a_{k+2} = - \frac{\lambda - (k+m)(k+m+1)}{(k+2)(k+1)} a_k \qquad (5.48)$$

وهكذا نجد أن الحدود a_{k+2} تعطي بدلالة a_k فالزوجية بدلالة الزوجية والفردية بدلالة الفردية وتكون السلسلة بقوى فردية أو زوجية تبعا لدرجة الجداء الأول وأمثاله التي تؤخذ اختيارية.

ان شرط محدودية التابع الموجي تتطلب منا أن نقطع السلسلة عند حد معين q كأن يكون مثلا :

$$a_{q+2} \neq 0 \ , \quad a_q = 0 \qquad (5.49)$$

وعندئذ نجد من (5.48) أن :

$$\lambda = (q+m)(q+m+1) \quad , (q = 0, 1, 2, \ldots) \qquad (5.50)$$

فاذا فرضنا عددا كميا جديدا l يسمى العدد الكمي المداري (*Nombre quantique azimutal, Orbital quantum number*)، بحيث يكون :

$$l = q + m \qquad (5.51)$$

نجد أن العدد l يمكنه أن يأخذ القيم : $l = 0, 1, 2, \ldots$ ويحقق العلاقة $l \geqslant m$ وعندئذ نكتب الوسيط λ :

$$\lambda = l(l+1) \qquad (5.52)$$

أما المعادلة (5.45) فتكتب عندئذ بالشكل :

$$(1-x^2)u'' - 2x(m+1)u' + [l(l+1) - m(m+1)]u = 0 \qquad (5.53)$$

وهي معادلة ليجاندر وحلها سيكون بالشكل :

$$u(x) = a_{l-m} x^{l-m} + a_{l-m-2} x^{l-m-2} + \cdots \begin{cases} a_0 \\ a_1 \end{cases} \qquad (5.54)$$

ويمكن التعبير عن التابع $u(x)$ بتوابع ليجاندر $P_l^m(x)$ ولبرهان ذلك نفرض :

$$v = (x^2-1)^l \qquad (5.55)$$

الذي يحقق المعادلة التفاضلية :

$$(1-x^2)\, v' + 2lxv = 0$$

(5.56)

لنأخذ المشتق من المرتبة $l+m+1$ للمعادلة السابقة ونفرض :

$$v^{(l+m)} = \frac{d^{l+m}(x^2-1)^l}{dx^{l+m}} \equiv u_1$$

(5.57)

ويسهل حساب هذا المشتق باستعمال قاعدة ليبتنز وهي :

$$(yz)^{(n)} = y^{(n)}z + n\, y^{(n-1)} z' + \frac{n(n-1)}{2!} y^{(n-2)} z'' + \cdots + y z^{(n)} \quad (5.58)$$

وبالاشتقاق نلاحظ أن التابع u_1 يحقق المعادلة :

$$(1-x^2)\, u_1'' - 2x(m+1)\, u_1' + (l+m+1)(l-m)\, u_1 = 0 \quad (5.59)$$

وهي المعادلة نفسها التي يحققها التابع u أي أنه يجب أن يكون:

$$u = Const.\ u_1 \quad (5.60)$$

وبما أن ثابت التنظيم لم يعين حتى الآن فيمكننا أن نكتب الثابت في (5.60) يساوي $(1/2^l l!)$ وذلك حتى نحصل منها عند تبديل m بالصفر على كثيرة حدود ليجاندر المعروفة :

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l(x^2-1)^l}{dx^l} \quad (5.61)$$

وعندئذ نضع التابع u كما يلي :

$$u = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^{l+m}(x^2-1)^l}{dx^{l+m}} \quad (5.62)$$

وأخيرا فالتابع $\Theta(x)$ سيكون :

(5.63)

$$\Theta_l^m(x) = C_l^m\, P_l^m(x)$$

حيث C_l^m هو ثابت يعين من شرط التنظيم (5.32) أما $P_l^m(x)$ فهو تابع ليجاندر الموحد (وهو يتطابق مع كثير حدود ليجاندر المعطى بالعلاقة (4.70) التي رأيناها في الفصل السابق) التالي:

(5.64)

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} \left[\frac{(x^2-1)^l}{2^l l!} \right]$$

لقد استنتجت (5.64) باعتبار أن $m>0$ ولكنها يمكن أن تعمم على قيم m السالبة بفضل العلاقة المعروفة :

$$P_\ell^m = (-1)^m \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!} P_\ell^{-m}(x) \tag{5.65}$$

ومن (5.64) و (5.65) يسهل معرفة مجال تغير العدد الكمي m حيث نلاحظ مباشرة من الأولى أن P_ℓ^m ينعدم من أجل $|m|>\ell$ وبالتالي يكون :

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm \ell \tag{5.66}$$

ولحساب C_ℓ^m في (5.63) نطبق العلاقة (5.32) فنجد :

$$\int_0^\pi \Theta_\ell^{*m} \Theta_\ell^m \sin\theta \, d\theta = \int_{-1}^{+1} \Theta_\ell^{*m}(x) \Theta_\ell^m(x) \, dx = 1 \tag{5.67}$$

فاذا بدلنا $\Theta(x)$ بقيمها من (5.63) و (5.64) نجد أخيرا (ونكتفي هنا بكتابة النتيجة) :

$$C_\ell^m = \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{2} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} \tag{5.68}$$

وأخيرا نكتب تابع الزاوتين $Y(\theta,\varphi)$ بصورته النهائية من أجل قيم m الموجبة :

$$Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \Theta_\ell^m \Phi_m = \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_\ell^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \tag{5.69}$$

ولحساب Y_ℓ^m عندما $m<0$ نستخدم العلاقة (5.65). ولعل من المفيد في نهاية هذه الفقرة كتابة العبارة العامة للتوابع الكروية من أجل جميع قيم m الموجبة والسالبة وهي :

$$Y_\ell^m(\theta,\varphi) = a_m \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi} \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}} P_\ell^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi} \tag{5.70}$$

حيث :

$$a_m = \begin{cases} 1 & \text{if } m \geq 0 \\ (-1)^m & \text{if } m < 0 . \end{cases}$$

38 - المعنى الفيزيائي للعددين الكميين l و m :

(موءثر مربع العزم الحركي) $\hat{L}^2$ لنبحث عن العلاقة بين الموءثر

الذي رأيناه في الفصل السابق والقسم الزاوي من اللابلاسيان المعطى بالعلاقة (5.17) . ولهذا نقابل أولا بين موءثر هاملتون المحسوب في بداية هذا الفصل وبين تابع هاملتون في الميكانيك الكلاسيكي ، لجسيم يتحرك في حقل مركزي متناظر .

ان تابع لاغرانج لهذا الجسيم يساوي :

$$\mathcal{L} = T - V = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) - V(r) \quad (5.71)$$

ومنه :

$$P_r = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} \quad , \quad P_\varphi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} = m r^2 \dot{\varphi} \quad (5.72)$$

واستنادا الى ذلك نحسب تابع هاملتون فنجد :

$$H = \frac{P_r^2}{2m} + \frac{P_\varphi^2}{2mr^2} + V(r) \quad (5.73)$$

فاذا علمنا أن العزم الحركي $\vec{L}$ يعطى بالعلاقة (مع العلم أن الحركة تكون مستوية في هذه الحالة) :

$$\vec{L} = \vec{r} \times m\vec{v} = m r \vec{e}_r \times (\dot{r}\vec{e}_r + r\dot{\varphi}\vec{e}_\varphi) = m r^2 \dot{\varphi}\, \vec{e}_z \quad (5.74)$$

أي أن :

$$|L| = m r^2 \dot{\varphi} = P_\varphi \quad (5.75)$$

وبالتبديل في (5.73) نحصل على تابع هاملتون بدلالة العزم الحركي :

$$H = \frac{P_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \quad (5.76)$$

وبالانتقال الى ميكانيك الكم حيث تستبدل القيم الفيزيائية بموءثرات يكون :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2m} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + \hat{V}(r) = \frac{1}{2m}\left[-\hbar^2 \nabla_r^2 + \frac{\hat{L}^2}{r^2}\right] + \hat{V}(r) \quad (5.77)$$

أما معادلة شرودنغر فتوضع بالشكل :

$$\left[\frac{1}{2m}\left(-\hbar^2 \nabla_r^2 + \frac{\hat{L}^2}{r^2}\right) + \hat{V}(r)\right] \Psi(r,\theta,\varphi) = E\, \Psi(r,\theta,\varphi) \quad (5.78a)$$

$\frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(r)\right]$

أو بالشكل :

$$\left(\nabla_r^2 - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}\right)\psi(r,\theta,\varphi) + k^2(r)\,\psi(r,\theta,\varphi) = 0 \qquad (5.78b)$$

حيث $k^2(r)$ هو التابع نفسه المعطى بالعلاقة (5.20) . وبمقارنة هذه المعادلة مع معادلة شرودنغر (5.19) ينتج أن :

$$\left[\nabla^2(r) + \frac{1}{r^2}\nabla^2(\theta,\varphi)\right]\psi(r,\theta,\varphi) + k^2(r)\,\psi(r,\theta,\varphi) = 0$$

$$\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} = -\nabla^2(\theta,\varphi) \Rightarrow \hat{L}^2 = -\hbar^2\,\nabla^2(\theta,\varphi) \qquad (5.79)$$

وعندئذ نضع المعادلة (5.24) بالشكل :

$$\hat{L}^2\,Y(\theta,\varphi) = \hbar^2\,\lambda\,Y(\theta,\varphi) \qquad (5.24)'$$

وهنا يتضح المعنى الفيزيائي للعدد l : فالمقدار λ الذي يساوي $l(l+1)$ كما رأينا سابقا (انظر 5.52) هو القيمة الخاصة للمؤثر ($\nabla^2(\theta,\varphi)$ (أو المؤثر $\hat{L}^2$) .

أما المعنى الفيزيائي للعدد m فيظهر بوضوح من (5.29) التي تكتب بالشكل :

$$\nabla^2\,\Phi(\varphi) = -\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -m^2\,\Phi(\varphi)$$

وبالتالي فالعدد الكوانتي m هو القيمة الخاصة للمؤثر $d/d\varphi$) الذي يرتبط مع $\hat{L}_z$ بالعلاقة (4.5) .

لقد رأينا في الفصل السابق أن المؤثرات $\hat{H}$، $\hat{L}^2$، $\hat{L}_z$ تتبادل فيما بينها عندما يكون الحقل مركزيا (انظر 4.23 وما بعدها)؛ فهي مجموعة مؤثرات متآلفة وبالتالي تكون المتوافقات الكروية (التي حصلنا عليها في الفصل السابق كتوابع خاصة للمؤثرين $\hat{L}^2$ و $\hat{L}_z$ وحصلنا عليها في هذا الفصل بعد حل معادلة شرودنغر المتعلقة بالقسم الزاوي)، تكون توابع خاصة مشتركة لجميع المؤثرات الثلاثة المذكورة سابقا .

39- حركة جسيم على كرة (الدوّار) (Rotator , Rotateur) :

يطلق اصطلاح الدوّار في الميكانيك الكلاسيكي ، على أي جسيم يتحرك بحيث يبقى بعده عن نقطة ثابتة يساوي مقدارا ثابتا ؛ فهو بالتالي يتحرك على كرة مركزها O . وبالرغم من أن مفهوم الحركة

بمعناه الكلاسيكي غيرواردفي ميكانيك الكم فقد استخدمنا هـذا الاصطلاح لكي يتسنى فهم هذا المثال الذي تعتبر دراسته تطبيقا جيدا على التوابع الكروية، كما يستفاد من نتائجه لمعرفة طيوف الجزيئات ثنائية الذرة ولدراسة الحركة في أي حقل مركزي وخاصة اذا كان كولونيا (نظرية ذرة الهيدروجين) .

ان الكمون المركزي الذي يخضع له جسيم يتحرك على كرة نصف قطرها a هو :

$$V(r) = V(a) = C \quad (5.80)$$

وبما أن الطاقة الكامنة معينة بالتقريب الى ثابت اختياري فيمكن اختياره هنا بحيث يكون $V(a)=0$ وبالتالي فان الطاقة الكلية تساوي الطاقة الحركية في الفيزياء الكلاسيكية :

$$E = T = \frac{1}{2} m a^2 \dot{\varphi}^2 \quad (5.81)$$

وهنا في ميكانيك الكم نبدل الكمون بقيمته في (5.23) و λ بقيمتها فنجد :

$$\nabla_r^2 R(r) + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = 0 \quad (5.82)$$

وبما أن $r = a = const.$ يكون :

$$R(r) = R(a) \Rightarrow \nabla_r^2 R(r) = \nabla_r^2 R(a) = 0$$

ومنه نحسب طاقة الجسيم من (5.82) فنجد :

$$\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} = 0 \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2ma^2} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2J} \quad (5.83)$$

حيث $J = ma^2$ هو عزم عطالة الجسيم بالنسبة الى مركز الكرة .

تبين العلاقة (5.83) أن طاقة الجسيم المدروس ستكون متقطعة وهي تتناسب مع $l(l+1)$ حيث l عدد صحيح ، كما رأينا ، وهذه الطاقة لاتتعلق بالعدد الكمي المغناطيسي m ولكن التابع الموجي المقابل $Y_l^m(\theta,\varphi)$ يتعلق بـ m وبما أن m يمكن أن تتحول من $-l$ الى $+l$ فهي تأخذ $(2l+1)$ قيمة ، وسوية الطاقة المقابلة للقيمة l ستكون مؤلفة من انطباق عدد من السويات يساوي $(2l+1)$ سوية (درجة الانطباق) ، وهذا يعني أن كل التوابع الموجية التي لها العدد الكمي l نفسه وتختلف بالعدد المغناطيسي m تعطي الطاقة

نفسها فهي إذن لاتتعلق باتجاه العزم الحركي في الفراغ بل بقيمة هذا العزم ويسهل فهم ذلك اذا لاحظنا أن للحركة المدروسة تناظرا مركزيا وبالتالي فلكل الاتجاهات المارة في المركز القيمة نفسها. أما اذا تحرك الجسيم المدروس في حقل مغناطيسي $\vec{B}$ فاننا عمليا نكون قد انتقينا اتجاها ما في الفراغ هو اتجاه هذا الحقل وبالتالي يزول الانطباق المنوه عنه وتنفصل السويات المذكورة الى $(2l+1)$ سوية.

تسمى سويات الطاقة المختلفة بالقيم l بأسماء مختلفة، فالسوية التي تقابل $l=0$ تسمى الحالة s والسوية المقابلة $l=1$ الحالة p وهكذا حسب الجدول :

الحالة	s	p	d	f	g ...
العدد l	0	1	2	3	4 ...

(5.84)

لنحسب التابع الموجي المقابل لـ $l=0$ (الحالة s) فنجد حسب العلاقة (5.59) أن :

$$Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$$

(5.85)

أما الكثافة الاحتمالية الزاوية فتساوي

$$|Y_l^m|^2 = |Y_0^0|^2 = \frac{1}{4\pi}$$

وعندما $l=1$ تأخذ m القيم $-1, 0, 1$ وبالتالي نحصل على التوابع Y_1^{-1}, Y_1^0, Y_1^1 التي يسهل حسابها من العلاقة العامة فنجد :

$$\left.\begin{aligned} Y_1^{-1}(\theta,\varphi) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, e^{-i\varphi}\sin\theta \\ Y_1^{0}(\theta,\varphi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\, \cos\theta \\ Y_1^{1}(\theta,\varphi) &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, e^{i\varphi}\sin\theta \end{aligned}\right\} \quad (5.86)$$

وتتساوى الكثافة الاحتمالية من أجل $m=1$ ، $m=-1$ في الحالتين Y_1^{-1}, Y_1^1 وهي :

$$|Y_1^1|^2 = |Y_1^{-1}|^2 = \frac{3}{8\pi}\sin^2\theta \quad (5.87)$$

أما عندما $m=0$ فنجد :

$$|Y_1^0(\theta,\varphi)|^2 = |Y_1^0(\theta)|^2 = \frac{3}{4\pi}\cos^2\theta \qquad (5.88)$$

وهذه التوابع مرسومة على الشكل (5.2) وليس من الصعب رسمها اذا لاحظنا تناظرها بالنسبة للمحورين oy ، oz لأنه عند تبديل θ بـ $-\theta$ أو θ بـ $\pi-\theta$ لايتغير كل من (5.87) و (5.88) وهكذا نرسم كل منهما في المجال $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$ ثم نأخذ النظير بالنسبة لـ oy و oz .

وهذه الأشكال مرسومة في المستوى zoy وللحصول على الشكل المقابل في الفراغ ينبغي تدويرها حول المحور oz باعتبار أن $|Y_l^m|^2$ لاتتعلق بالزاوية السمتية φ ويلاحظ في الشكل a أن احتمال وجود الجسيم لايتعلق بـ θ كما أنه لايتبع φ ؛ أي أن كل نقط الكرة متساوية الاحتمال في الحالة s وهذا واضح لأن مربع عزم كمية الحركة $\hat{L}^2 = \hbar^2 l(l+1)$ ينعدم في هذه الحالة والنقطة المادية (الجسيم) الساكنة في هذه الحالة (لأن $E = T = 0$) يمكنها أن توجد في أي نقطة من الكرة .

شكل (5.2)

أما عندما $m = \pm 1$ فالمواضع الأكثر احتمالا لوجود الجسيم على الكرة هي تلك التي تقع في المستوى xoy، ولنلاحظ أيضا أن الحالتين $m = +1$ و $m = -1$ لا تختلف احداها عن الأخرى الا بجهة الدوران فالأولى تقابل دورانا موجبا (بعكس اتجاه عقارب الساعة) والثانية سالبا .

ومن أجل $m = 0$ نجد أن النقط الأكثر احتمالا هي تلك التي تمر

المستويات الحاوية لها من المحور oz (مستويات زوالية) .

يجدر بنا أخيرا أن نلاحظ أن هذه المناقشة تنطبق على كل الحركات التي لها تناظرمركزي .

40- قواعد الانتقاء (Selection rules) :

سندرس في الفقرة التغيرات الممكنة في قيمة الأعداد الكوانتية والتي بنتيجتها يحدث الاشعاع في حالة الحركة على الكرة المدروسة سابقا ، فاذا تعين موضع الجسيم بنصف القطر الشعاعي $\vec{r}$ فان احتمال انتقال الجسيم من مدار موصوف بالعددين الكميين l و m الى مدار آخر موصوف بالعددين الكميين l' و m' طبقا لنظرية أنشتين ، يمكن أن يوصف بعنصر المصفوفة التالي :

$$\langle l,m|r|l',m'\rangle = \int (Y_{l'}^{m'})^* \, r \, Y_l^m \, d\Omega \tag{5.89}$$

اذ أن القسم القطري من التابع الموجي يساوي مقدارا ثابتا ، أما $d\Omega$ فهي عنصر الزاوية المجسة وتساوي : $d\Omega = \sin\theta \, d\theta \, d\varphi$

ويسهل بعد حساب $\langle l,m|r|l',m'\rangle$ ايجاد تواتر الاشعاع ω وطاقته، ولا يحدث أي اشعاع الا عندما يختلف عنصر (المصفوفة) $\langle l,m|r|l',m'\rangle$ عن الصفر. في الحالة المدروسة سابقا (حركة جسيم على كرة) يمكن تعيين $\vec{r}$ بالاحداثيات الجديدة التالية :

$$\left.\begin{aligned} z &= a\cos\theta \\ \xi &= x+iy = a\sin\theta\, e^{i\varphi} \\ \eta &= x-iy = a\sin\theta\, e^{-i\varphi} \end{aligned}\right\} \tag{5.90}$$

واضح أن هذه الاحداثيات الجديدة تعني أنه يمكن تقسيم الحركة الى ثلاثة أقسام :

الأولى : حركة اهتزازية على المحور oz .

الثانية : حركة دورانية بالاتجاه الموجب حول oz.

الثالثة : حركة دورانية بالاتجاه السالب حول oz، وكلتا الحركتين الأخيرتين تحدثان في المستوى xoy، وهكذا فان عنصر المصفوفة ينقسم الى ثلاثة عناصر:

$$\langle l,m|Z|l',m'\rangle = \int (Y_{l'}^{m'})^* \cos\theta \, Y_l^m \, d\Omega$$

$$\left.\begin{aligned} \langle l,m|\xi|l',m'\rangle &= \int (Y_{l'}^{m'})^* \sin\theta \, e^{i\varphi} \, Y_l^m \, d\Omega \\ \langle l,m|\eta|l',m'\rangle &= \int (Y_{l'}^{m'})^* \sin\theta \, e^{-i\varphi} \, Y_l^m \, d\Omega \end{aligned}\right\} \quad (5.91)$$

حيث فرضنا للتسهيل أن الثابت a يساوي الواحد ، ولحساب عناصر المصفوفة (5.91) نستفيد من العلاقات التكرارية للتوابع الكروية :

$$\left.\begin{aligned} \cos\theta \, Y_l^m &= A \, Y_{l+1}^m + B \, Y_{l-1}^m \\ \sin\theta \, e^{\pm i\varphi} \, Y_l^m &= A_\pm \, Y_{l+1}^{m\pm 1} + B_\pm \, Y_{l-1}^{m\pm 1} \end{aligned}\right\} \quad (5.92)$$

حيث A ، B ، $A_\pm$ ، $B_\pm$ ثوابت لاتتعلق بـ θ و φ فاذا بدلنا في (5.91) ولاحظنا شرط توامد التوابع الكروية وهو كالتالي : $\int (Y_{l'}^{m'})^* Y_l^m \, d\Omega = \delta_{mm'} \delta_{ll'}$ فيمكن وضع (5.91) بالشكل التالي :

$$\left.\begin{aligned} \langle l,m|Z|l',m'\rangle &= \text{Const.} \; \delta_{m'm} \, \delta_{l',l\pm 1} \\ \langle l,m|\xi|l',m'\rangle &= \text{Const.} \; \delta_{m',m+1} \, \delta_{l',l\pm 1} \\ \langle l,m|\eta|l',m'\rangle &= \text{Const.} \; \delta_{m',m-1} \, \delta_{l',l\pm 1} \end{aligned}\right\} \quad (5.93)$$

وهكذا نجد بالنسبة للحركة الاهتزازية على المحور Z أن الاشعاع ممكن فقط في الحالة التي يتغير فيها العدد المغناطيسي m ، أما l' فيمكن أن يزيد أو ينقص بمقدار الواحد وفيما عدا ذلك فلا يحدث أي اشعاع لأن عنصر المصفوفة يساوي الصفر أي أن :

$$\Delta m = m - m' = 0 \quad , \quad \Delta l = l - l' = \pm 1 \qquad (5.94)$$

أما في حالة الدوران الموجب فسيكون التغير المسموح به للعددين الكميين l , m :

$$\Delta m = -1 \quad , \quad \Delta l = \pm 1 \qquad (5.95)$$

وأخيرا في حالة الدوران السالب نجد أن :

$$\Delta m = +1 \quad , \quad \Delta l = \pm 1 \qquad (5.96)$$

ونلخص ما سبق بقولنا أن التغيرات المسموح بها هي :

$$\Delta m = 0, \pm 1, \quad \Delta l = \pm 1 \tag{5.97}$$

ونذكر هنا أيضا بأن هذه القواعد الانتقائية صحيحة من أجل كل الحركات في الحقل المركزي وبصورة خاصة من أجل ذرة الهيدروجين .

ويمكننا الآن حساب التواترات الممكنة للاشعاع (أو الامتصاص) بالعلاقة المعروفة التالية :

$$\omega_{ll'} = 2\pi \nu_{ll'} = (E_l - E_{l'})/\hbar \tag{5.98}$$

وبتبديل E و E' بقيمتيهما من (5.83) نجد :

$$\omega_{ll'} = \frac{\hbar}{2J}\left[l(l+1) - l'(l'+1)\right]$$

ثم ملاحظة (5.97) نجد :

$$\omega_{l,l-1} = \hbar l / J \tag{5.99}$$

$$\omega_{l,l+1} = -\hbar(l+1)/J \tag{5.100}$$

فالأولى توافق الانتقال من سوية طاقة الى أخرى أدنى منها ولذلك كانت ω موجبة أما الثانية حيث ω سالبة فتوافق الانتقال من سوية طاقة الى أخرى أعلى منها .

41 - طيوف الجزئيات ثنائية الذرة :

(The specter of two - atom molecule, Spectre de molecules diatomiques)

من المعلوم في الميكانيك الكلاسيكي أن دراسة حركة مجموعة مادية موءلفة من ذرتين في حقل مركزي (شكل 5.3) توءول الى حركة مركز الثقل وحركة نقطة مادية كتلتها هي الكتلة المختزلة للذرتين فاذا اعتبرنا مركز الثقل ساكنا ، (أو وضعنا مركز المجموعة الاحداثية في هذا المركز) ، فان احداثيات الذرتين يمكن أن تكتب بدلالة الاحداثي النسبي لهما x (البعد بينهما) بالشكل التالي :

$$x_1 = \frac{m_2 x}{m_1 + m_2}, \quad x_2 = \frac{m_1 x}{m_1 + m_2}$$

شكل (5.3)

أما عزم عطالتها :

$$J = m_1 x_1^2 + m_2 x_2^2 = m_1 \frac{m_2^2 x^2}{(m_1+m_2)^2} + m_2 \frac{m_1^2 x^2}{(m_1+m_2)^2} = \mu x^2 \quad (5.101)$$

حيث $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$ هي الكتلة المختزلة للذرتين ، فاذا كان البعد بين الذرتين ثابتا (a) وكان كمون التأثير المتبادل بينهما تابعا فقط لـ a أي $V(r) = V(a) = const.$ (نأخذه مساويا الصفر) ثم نبدل ذلك في معادلة شرودنغر (5.82) فسنجد عند دراسة الطيف أنه يمكن الحصول على النتائج السابقة نفسها اذا بدلنا x من (5.101) بـ a اذ نجد مثلا بالنسبة للاشعاع الناتج عن الدوران الموجب العبارة (5.99) نفسها أي :

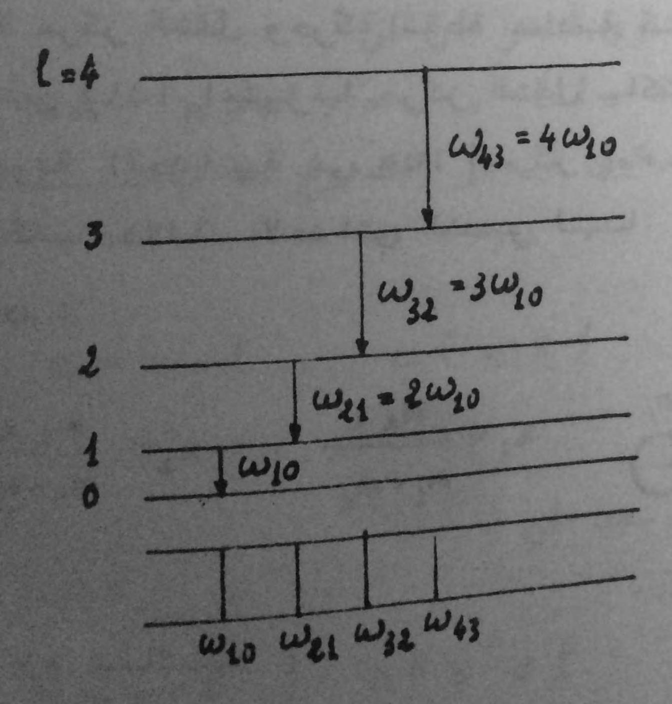
$$\omega_{ll'} = \omega_{l,l-1} = \frac{\hbar l}{J} = \frac{\hbar l}{\mu a^2} = 2Bl \quad (5.102)$$

حيث :

$$B = \hbar / 2J = \hbar / 2\mu a^2$$

ونلاحظ أن التواتر يتناسب طردا مع l أما طيف الاشعاع فهو موضح على الشكل (5.4) من أجل القيم المختلفة لـ l ، لكن الخطوط الطيفية تقع على مسافات متساوية بعضها عن بعض في الطيف لأن الفرق بين تواترين متتاليين ثابت اذ أن :

$$\omega_{l,l+1} - \omega_{l,l-1} = 2B(l+1) - 2Bl = 2B = \text{ثابت}$$



شكل (5.4)

الطيف الدوراني للجزئيات ثنائية الذرة .

ويسهل دراسة طيف الذرات التي تتحرك بحركة اهتزازية حول وضع التوازن اذا علمنا أن تمثيل الكمون $V(r)$ بينها بالشكل (٥.٥) ، ولكن كثيرا ما نبحث عند حل معادلة شرودنغر (بعد تبديل الكمون السابق فيها) بجوار النقطة $r=a$ (وضع التوازن) باعتبار أن الاهتزاز يتم حول هذا الوضع ، ولذلك ننشر $V(r)$ في جوار النقطة a كما يلي :

$$V(r) = V(a+x) = V(a) + xV'(a) + \frac{x^2}{2!} V''(a) + \cdots$$

الا أن $V'(a)=0$ بسبب وجود النهاية الصغرى فاذا فرضنا أن :

$$V(a) = -D \,, \quad V''(a) = \mu\omega^2 \tag{5.103}$$

فيمكن كتابة $V(r)$ بالشكل :

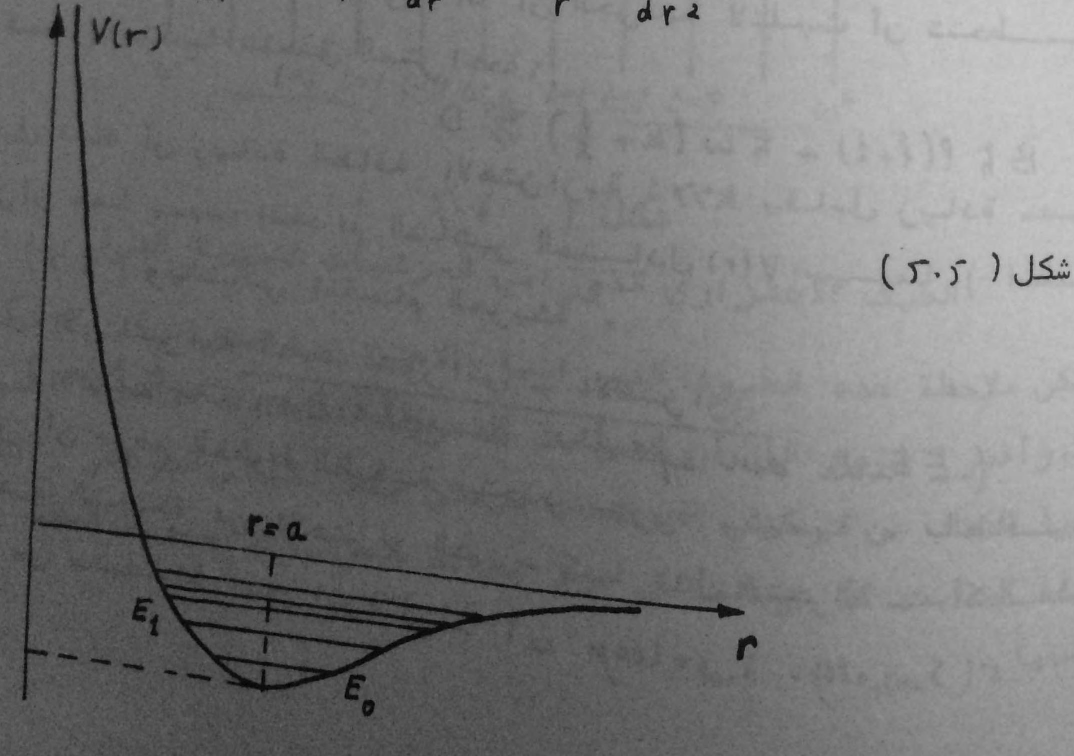
$$V(r) = -D + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \tag{5.104}$$

ولحساب قيم الطاقة المقابلة لهذا الكمون يجب حل معادلة شرودنغر الموافقة بعد تبديل m بـ μ :

$$\nabla_r^2 R + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - V(r) - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2}\right] R = 0 \tag{5.105}$$

حيث :

$$\nabla_r^2 R = \frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} = \frac{1}{r}\frac{d^2(rR)}{dr^2}$$



شكل (٥.٥)

نأخذ متحولا جديدا $u = rR$ فنجد أن :

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E + D - \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{\mu r^2}\right]u = 0 \quad (5.106)$$

فاذا لاحظنا أن :

$$\frac{1}{r^2} = \frac{1}{(a+x)^2} \simeq \frac{1}{a^2}$$

وفرضنا أن :

$$E' = E + D - B\hbar l(l+1) \quad (5.107)$$

حيث :

$$J = \mu a^2 \ , \quad B = \hbar / 2J$$

نجد أخيرا أنه يمكن كتابة المعادلة (5.106) بالشكل التالي :

$$u'' + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E' - \frac{\mu\omega^2 x^2}{2}\right)u = 0 \quad (5.108)$$

وهي تتطابق مع معادلة الهزاز التوافقي وبالتالي فالطاقة E' تساوي:

$$E' = \hbar\omega\left(K + \frac{1}{2}\right) \quad : \quad K = 0, 1, 2, 3 \ldots\ldots \quad (5.109)$$

أما الطاقة الكلية E (الدورانية والاهتزازية) فتساوي :

$$E = -D + B\hbar l(l+1) + \hbar\omega\left(k + \frac{1}{2}\right) \quad (5.110)$$

حيث يمثل الحد الأول فيها طاقة الارتباط (سالب) بين الذرتين والثاني الطاقة الدورانية والثالث الاهتزازية . ويلاحظ أن عدد سويات الطاقة المتقطعة محدود اذ أن الجزئية لاتلبث أن تتحطم (تنقسم) عندما تتحقق المتراجحة :

$$B\hbar l(l+1) + \hbar\omega\left(k + \frac{1}{2}\right) \geqslant D$$

وتعليل ذلك أن زيادة الطاقة الاهتزازية $k \gg 1$ يقابل زيادة سعة الاهتزاز مما يسبب انعدام التأثير المتبادل $V(r)$ بينهما (انظر الشكل (5.5)) وبالتالي انقسام الجزيئة .

لننتقل الآن لدراسة الطيف الدوراني — الاهتزازي (*Etude du spectre de vibration - rotation*)

سنعتبر أن موضع الخطوط الطيفية الاشعاعية الناتجة عن الاهتزاز التي - كما تدل التجربة - أكبر بكثير من مثيلتها الدورانية (اذ أن $\lambda_{rot} = 100\mu$ ، $\lambda_{vib} = 10\mu$) ، يتحدد بصورة رئيسية ، بالطاقة

فاذا اضفنا الى ذلك أن الاشعاع يتم في حالة الاهتزاز عندما تنقص k بمقدار الواحد وفي حالة الدوران عندما تتغير l (زيادة او نقصانا) بمقدار الواحد فيمكن كتابة تواتر الاشعاع الناتج ω' :

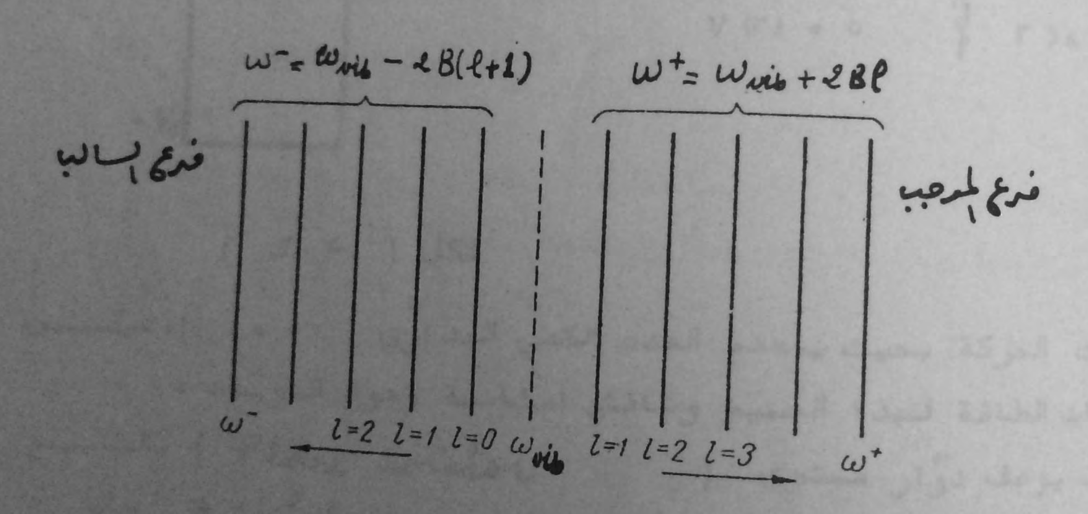
$$\omega' = [E(k,l) - E(k-1, l\pm 1)]/\hbar \qquad (5.111)$$

الذي يكتب حسب (5.110) بالشكل $\omega' = \omega + \omega_{ll'}$ حيث $\omega_{ll'}$ التواتر الناتج عن الدوران ويأخذ القيمتين :

$$\omega_{l,l-1} = 2Bl \quad , \quad \omega_{l,l+1} = -2B(l+1)$$

ثم بالتبديل في $\omega' = \omega + \omega_{ll'}$ نجد فرعين (من اجل k معينة) موضحين على الشكل(5.6)وهما :

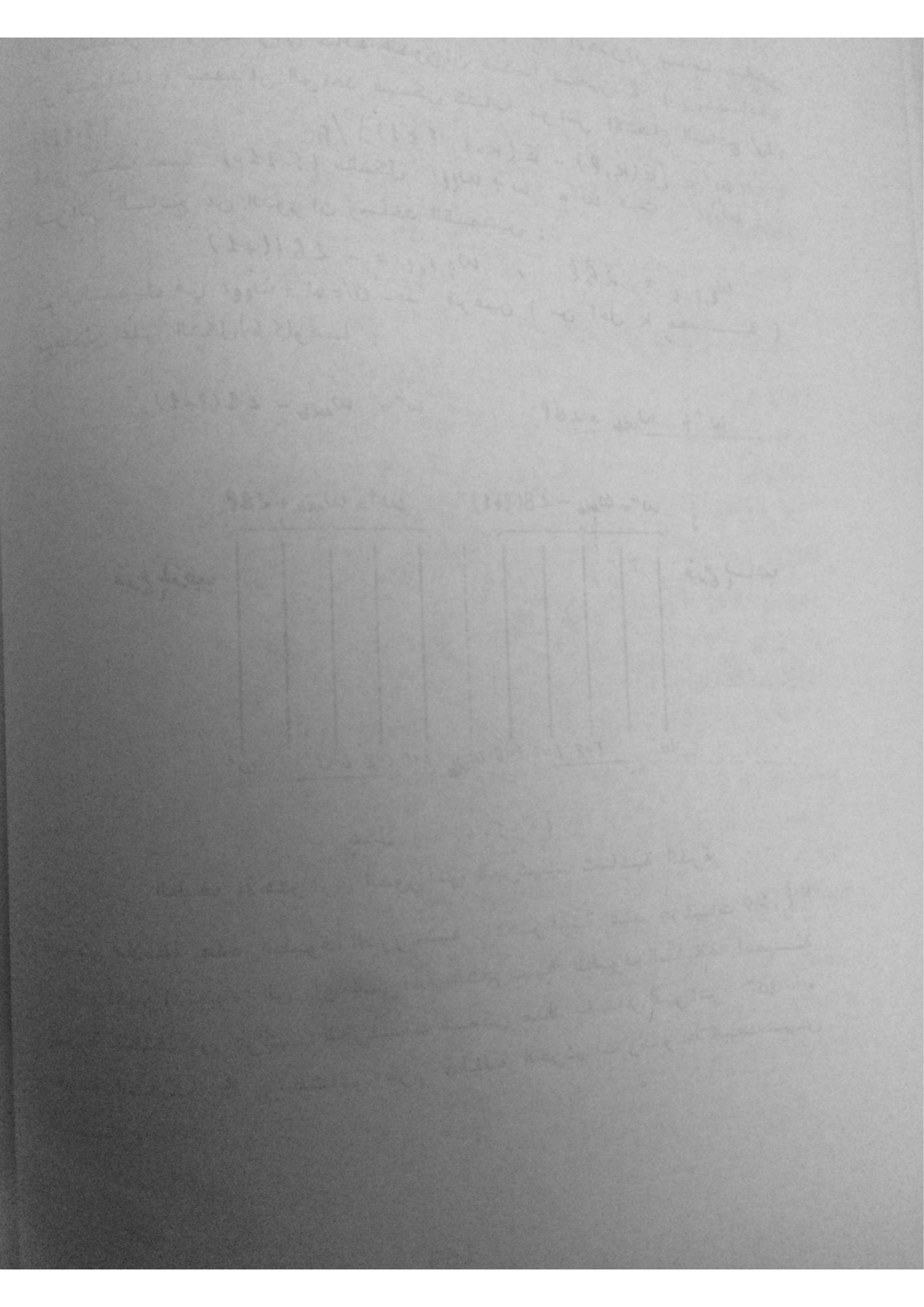
$$\omega^+ = \omega_{vib} + 2Bl \quad , \quad \omega^- = \omega_{vib} - 2B(l+1)$$



شكل (5.6)

الطيف الاهتزازي الدوراني للجزئيات ثنائية الذرة

ويمكن ملاحظة هذه الطيوف الدورانية الاهتزازية عند جزئيات HCl, CO مثلا. وأخيرا ننوه الى أن للدراسة التجريبية للطيوف السابقة أهمية كبيرة للكشف عن تركيب الجزئيات فيمكن مثلا بقياس التواتر ω^- ، معرفة الثابت B وبالتالي عزم عطالة الجزئيات ومتوسط البعد بين ذرتيها .

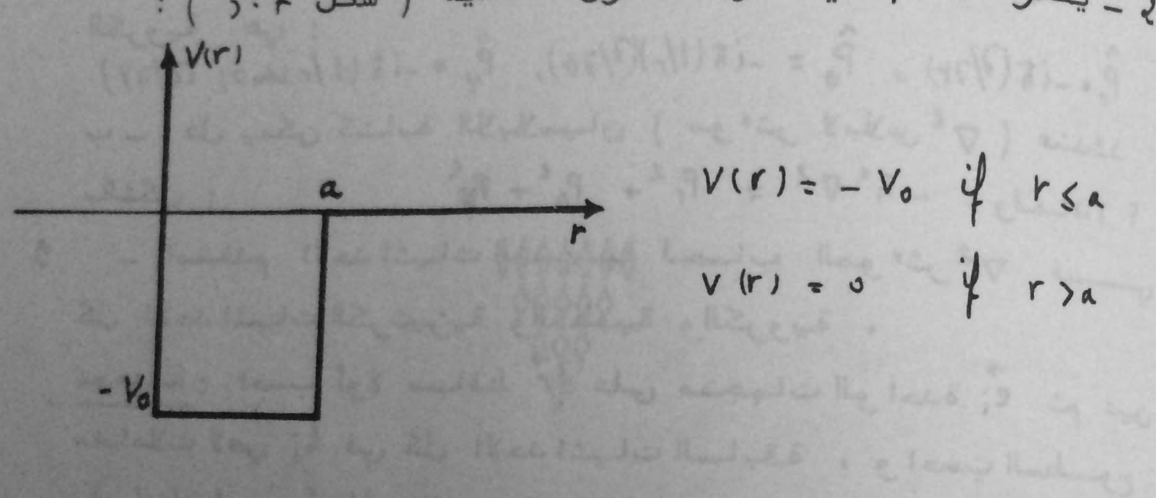


مسـائـل الفصـل الخامـس

1 - استفد من دراستك للحركة في حقل مركزي في الحالة العامة لدراسة حركة جسيم حر في الاحداثيات الكروية . ادرس بصورة خاصة الحالة $l = 0$ (الحالة s) .

احسب التابع الموجي لهذه الحالة واحسب ثابت التظيم .

2 - يتحرك جسيم في حفرة الكمون التالية (شكل 5.7) :



شكل (5.7)

تحدث الحركة بحيث ينعدم العدد الكمي المداري ($l = 0$)، عين سويات الطاقة لهذا الجسيم وناقش امكانية وجود السويات .

3 - يوصف دوّار مستوى (Plane rotator) بالتابع الخاص التالي : $\psi = A \sin^2 \varphi$

آ - احسب ثابت التنظيم A .

ب - ما هو احتمال ظهور الحالات التالية : $m = 0,\ m = \pm 1,\ m = \pm 2$

و - اخسب متوسط $\hat{L}_z$ و $\hat{L}_z^2$ لهذا الدوار .

4 - انشر الموجة المستوية التالية $e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta}$ بدلالة التوابع الكروية Y_l^m مع العلم أن هذه التوابع تحقق الشرط $\langle l, m | l', m' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$ (شرط التمام أو الانغلاق) :

5 - احسب متوسط موءثرهاملتون $\hat{H}$ والموءثر $\hat{L}_z$ في حالة الدوار

مع العلم أن Y_ℓ^m هي توابع خاصة لكل منهما . ثم احسب متوسط المؤثرين $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$ (اللذين يتبادلان مع $\hat{L}_z$).

احسب أخيرا متوسط $\hat{z}$ الذي يتبادل مع $\hat{L}_z$ ولا يتبادل مع $\hat{H}$.

6 – يطلب حل معادلة شرودنغر لجسيم يتحرك في حقل الكمون التالي :

$$V(r) = A r^2 + B/r^2$$

7 – أعد السؤال نفسه من أجل الحقل $V(r) = -V_0 e^{-r/a}$ وذلك في الحالة S ($\ell = 0$).

8 – آ – برهن أن مركبات مؤثر الاندفاع $\hat{p}$ بالاحداثيات الكروية هي :

$$\hat{P}_r = -i\hbar(\partial/\partial r), \quad \hat{P}_\theta = -i\hbar(1/r)(\partial/\partial\theta), \quad \hat{P}_\varphi = -i\hbar(1/r\sin\theta)(\partial/\partial\varphi)$$

ب – هل يمكن كتابة اللابلاسيان (موءثر لابلاس ∇^2) عندئذ بالشكل : $-\hbar^2\nabla^2 = P_r^2 + P_\theta^2 + P_\varphi^2$ ، ولماذا ؟

9 – استخدم الاحداثيات المنحنية لحساب الموءثر ∇^2 في كل الاحداثيات الكرتيزية والقطبية والكروية .

توجيه : احسب أولا مساقط $d\vec{r}$ على متجهات الواحدة $\vec{e}_i$ ثم عين معاملات لامي h_i في كل الاحداثيات السابقة ، واحسب السطوح ds_i ($i = 1,2,3$) للحجم العنصري dV الموءلف من التزايدات $d\vec{e}_i$ ثم استخدم التعريف التالي :

$$\operatorname{div}\vec{B} = \lim_{\Delta S\to 0}\frac{\vec{B}\cdot\Delta\vec{S}}{\Delta V} = \frac{1}{dV}\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}(B_i\, ds_i)\, dx_i$$

(حيث : $\vec{B} = \overrightarrow{grad}\,\psi$ ، ψ هو تابع ما للاحداثيات).

10 – احسب متوسطات $\hat{L}_x$ ، $\hat{L}_y$ ثم احسب $\langle \hat{L}_x \hat{L}_y \rangle$ ، وبرهن أن

$$\langle \hat{L}_y^2 \rangle = \langle \hat{L}_x^2 \rangle$$

11 – يدور جسم صلب حول المحور oz . احسب طاقة هذا الجسم بدلالة $\hat{L}_z$ ، برهن أن هذه الطاقة تعطى بالعلاقة :

$$E(m) = \hbar^2 m^2 / 2I$$

وهي تقابل التابع الخاص

$$u_m = e^{im\varphi}$$

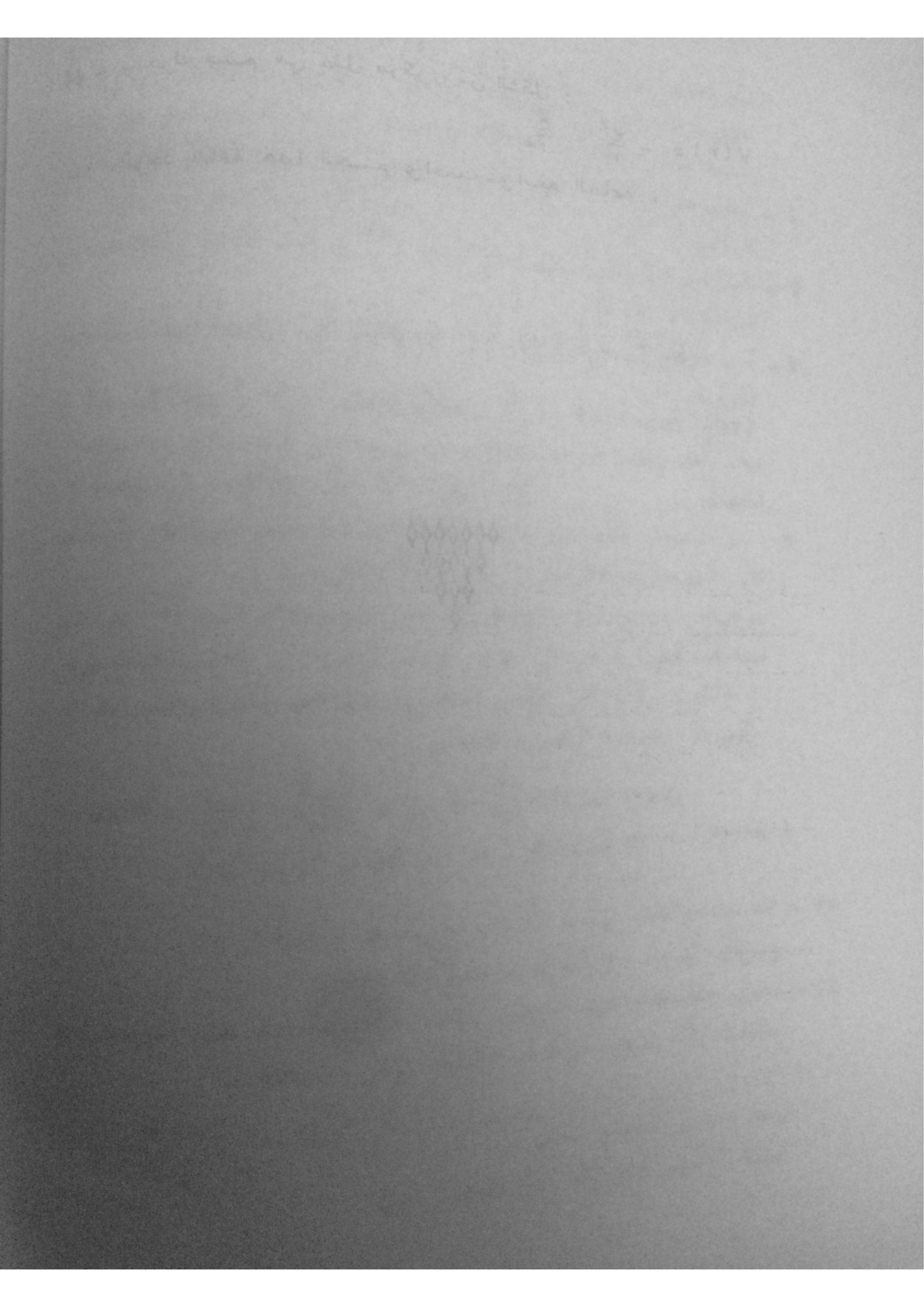
حيث I عزم المعطاة حول المحور oz .

١٢ - يتحرك جسيم في حقل مركزي من الشكل :

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} - \frac{c}{r^2}$$

أوجد طاقة هذا الجسيم واحسب توابعه الخاصة .





الذرّات الشبيهة بالهيدروجين

كتطبيق على الحركة في حقل مركزي سندرس حركة الالكترون في حقل النواة الكهربائي عندما تحوي النواة Z بروتوناً في الحالة العامة ولذلك فان هذه الدراسة تنطبق على كل الذرات من ابسطها الى أعقدها ولكنها أكثر توافقاً مع التجربة عندما تطبق على ذرة الهيدروجين بجميع نظائره ($_1H^1$, $_1H_1^2$, $_1H_2^3$) والذرات الأخرى التي تحوي الكترونات أقل عدداً وذلك لأننا نهمل في هذه الدراسة تأثير الالكترونات بعضها مع بعض حول النواة ، هذا التأثير الذي يوءخذ بعين الاعتبار كتقريب من الدرجة الثانية ، عندما تحل المسألة استناداً الى نظرية الاضطراب .

ويجدر بنا أن نلاحظ التشابه من الناحية الرياضية ، بين هذه المسألة ومسألة حركة الكواكب السيارة حول الشمس (مسألة كبلر) .

4ـ1 ـ التوابع الخاصة والقيم الخاصة (Fonctions propres, Valeurs propres) :

لنلاحظ أولاً أن الكمون الذي يخضع له الكترون في مجال نواة

شحنتها الموجبة Ze يساوي :

$$V = -\frac{Ze^2}{r}$$

(6.1)

وهو يتعلق فقط بـ r من أجل نواة معينة وذلك ما يعتبر مثالاً جيداً للحركة في الحقل المركزي ، فاذا وضعنا مركز الاحداثيات في مركز النواة فان التوابع الزاوية $Y_l^m(\theta,\varphi)$ يمكن أن تعتبر معلومة (انظر الفصل السابق) ، أما التابع القطري $R(r)$ فيمكن معرفته بعد حل المعادلة :

$$\nabla_r^2 R(r) + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E + \frac{Ze^2}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right] R(r) = 0 \qquad (6.2)$$

حيث m كتلة الألكترون ، ولحلها نفرض أن :

$$V_{eff} = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \qquad (6.3)$$

ويسهل رسمه كما في الشكل (6.1) بملاحظة أنه موءلف من فرعين نرسم كلاً منهما ثم نجمع الرسمين ويتضح مباشرة من الشكل أنه عندما تكون E (الطاقة الكلية لجسيم) أصغر من الصفر ($E < 0$) فان الجسيم يتحرك في المجال $r_{min} \leq r \leq r_{max}$ لأنها لايمكن أن تقع على يسار النقطة $r_1 = r_{min}$ فالكمون عندئذ سالب وهو أصغر بالقيمة المطلقة من E السالبة ، لذلك فان المقدار $T = \frac{p^2}{2m} = E - V$ سيكون أصغر من الصفر وهذا غير ممكن . المناقشة نفسها ، بالنسبة للنقط التي على يمين $r_2 = r_{max}$ وبالتالي فان النقطتين M_1 ، M_2 تمثلان نقطتي انعطاف بالنسبة لأي جسيم يتحرك في الكمون (6.1) حيث تكون طاقته الحركية مساوية للصفر . أما اذا كانت $E > 0$ فان الجسيم سيتحرك في المجال $r \geq r_3$ والنقطة $r = r_3$ تمثل نقطة انعطاف ويكون عندها $E = V$ أي أن $T = 0$ وبما أن موضع الالكترون في الذرة سيكون محدداً لكي يدور حول النواة باستمرار فانه يجب أن يكون $E < 0$ ونقبل أن الحركة ستكون بين النقطتين M_1 ، M_2 ونكتب معادلة شرودنغر (6.2) بالشكل :

$V_{eff}(r)$

$E>0$

r_3 r_{min} r_{max}

r

$E<0$

M_1 M_2

شكل (6.1)

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \left[-A + \frac{2B}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0 \qquad (6.4)$$

حيث فرضنا :

$$\frac{mZe^2}{\hbar^2} = B > 0 \quad , \quad -\frac{2mE}{\hbar^2} = A > 0$$

لنفرض متحولاً جديداً $\rho = 2\sqrt{A}\, r$ ونلاحظ أن :

$$\frac{dR}{dr} = \frac{dR}{d\rho}\frac{d\rho}{dr} = 2\sqrt{A}\,\frac{dR}{d\rho} = 2\sqrt{A}\,R'$$

$$\frac{d^2R}{dr^2} = \frac{d}{dr}\left(\frac{dR}{dr}\right) = \frac{d}{dr}\left(2\sqrt{A}\,\frac{dR}{d\rho}\right) = 4A\,\frac{d^2R}{d\rho^2} \; ,$$

وبالتبديل في (6.4) نجد أخيراً، بعد تقسيم طرفي المعادلة على 4A، المعادلة:

$$R'' + \frac{2}{\rho}R' + \left[-\frac{1}{4} + \frac{B}{\rho\sqrt{A}} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R = 0 \qquad (6.5)$$

ويمكن أن نكتبها أيضاً بالشكل :

$$\frac{d^2(R\rho)}{d\rho^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{B}{\rho\sqrt{A}} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\rho R = 0 \qquad (6.5)'$$

ولحل هذه المعادلة نفتش أولاً عن حلين خاصين عندما $r = \infty, r = 0$ $(\rho = \infty, \rho = 0)$ ثم نبحث عن الحل العام بالشكل $R = R_\infty R_0 u(\rho)$. لنبحث أولاً عن الحل عندما $\rho \to \infty$ (بالرغم أن الجسيم عندما $E < 0$ لاتصل الى اللانهاية ولكن هذا ضروري لايجاد الحل العام)، فيمكن عندئذ اهمال بعض الحدود لصغرها أمام الحدين الباقيين وبالتالي تصبح المعادلة (6.5) :

$$R''_\infty - \frac{1}{4}R_\infty = 0 \qquad (6.6)$$

وحلها من الشكل :

$$R_\infty = c_1 e^{-\rho/2} + c_2 e^{\rho/2} \quad (6.7)$$

ان شرط محدودية التابع يحتم علينا كتابة $c_2 = 0$ وبامكاننا أيضا اعتبار $c_1 = 1$ أما عندما $\rho \to 0$ فيمكن كتابة المعادلة (6.5) بالشكل :

$$R''_0 + \frac{2}{\rho} R'_0 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} R = 0 \quad (6.8)$$

فاذا فرضنا حلاً من الشكل $R = \rho^q$ واشتقينا ثم بدلنا في (6.8) فاننا نجد أخيراً :

$$[q(q-1) + 2q - l(l+1)]\rho^{q-2} = [q(q+1) - l(l+1)]\rho^{q-2} \equiv 0$$

ومنه نجد الحلين : $q_1 = l, \quad q_2 = -(l+1)$. أي أن :

$$R_0 = c_1 \rho^l + c_2 \rho^{-(l+1)} \quad (6.9)$$

وهنا أيضا ينبغي أن نضع $c_2 = 0$ كي لاتصل R_0 الى اللانهاية عندما تنتهي $\rho \to 0$ كما يمكن أن نضع $c_1 = 1$ باعتبار أن التابع R_0 يعتبر غير منظم حتى الآن أي :

$$R_0 = \rho^l \quad (6.10)$$

لنبحث الآن عن الحل العام للمعادلة $(6.5)'$ بالشكل :

$$\rho R = \rho R_\infty R_0 u = \rho^{l+1} e^{-\rho/2} u = v u \quad (6.11)$$

ولتعيين التابع المجهول u نبدل في المعادلة $(6.5)'$ وبعد الاشتقاق ثم التقسيم على v فنجد أخيراً :

$$u'' + 2u' \frac{v'}{v} + \left[\frac{v''}{v} - \frac{1}{4} + \frac{B}{\rho\sqrt{A}} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] u = 0 \quad (6.12)$$

فاذا لاحظنا من(6.11)أن :

$$\ln v = -\tfrac{1}{2}\rho + (l+1)\ln\rho \Rightarrow \frac{v'}{v} = -\frac{1}{2} + \frac{l+1}{\rho} \Rightarrow$$

$$v' = \left[-\frac{1}{2} + \frac{(l+1)}{\rho}\right]v \Rightarrow v'' = -\frac{l+1}{\rho^2}v + \left(-\frac{1}{2} + \frac{l+1}{\rho}\right)^2 v \Rightarrow$$

$$\frac{v''}{v} = \frac{1}{4} - \frac{l+1}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2},$$

وبدلنا في (6.12) نجد أخيراً المعادلة :

$$\rho u'' + [2(l+1)-\rho]u' + \left[\frac{B}{\sqrt{A}} - (l+1)\right]u = 0 \qquad (6.13)$$

ولحساب التابع u نفرض الحل بشكل كثير حدود بقوى ρ . إن شروط محدودية التابع الموجي عندما $\rho \to 0$ وعندما $\rho \to \infty$ تجعلنا نؤكد مسبقاً أن قوى كثيرة الحدود ستكون موجبة ومحدودة أي :

$$u = \sum_{\nu=0}^{k} a_\nu \rho^\nu \qquad (6.14)$$

وبالاشتقاق والتبديل في (6.13) نجد :

$$\sum_{\nu=0}^{k} \rho^\nu \left\{a_\nu\left(\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1 - \nu\right) + a_{\nu+1}\left[\nu(\nu+1) + 2(\nu+1)(l+1)\right]\right\} \equiv 0 \qquad (6.15)$$

وهي مطابقة تعطينا $a_{\nu+1}$ بدلالة a_ν الذي يمكن اعتباره اختيارياً وبما انها كثيرة حدود محدودة سيكون اذن : $a_k \neq 0$ ، $a_{k+1} = 0$ ، ومنه :

$$\frac{B}{\sqrt{A}} = k + l + 1 = n \qquad (6.16)$$

حيث n : العدد الكمي وهو أكبر من مجموع العددين الكميين المداري l ($l = 0, 1, 2, \dots$) والقطري ($k = 0, 1, 2, \dots$) بعدد واحد ويسمى العدد الكمي الرئيسي ويساوي : $n = 1, 2, 3, \dots$.

بملاحظة (6.16) التي ينتج منها أن : $\frac{B}{\sqrt{A}} - l - 1 = k$

يمكن كتابة العلاقة التكرارية :

$$a_\nu(k-\nu) = -a_{\nu+1}\left[(\nu+1)(\nu+2l+2)\right] \qquad (6.17)$$

فاذا كتبنا أن $a_k = (-1)^k$ وحسبنا كل العوامل الباقية فانه يمكن كتابة كثيرة الحدود لها (6.14) بالشكل :

$$u = (-1)^k\left\{\rho^k - \frac{k(k+s)}{1!}\rho^{k-1} + \frac{k(k-1)(k+s)(k+s+1)}{2!}\rho^{k-2} + \dots\right\} = \qquad (6.18)$$

$$= \sum_{j=0}^{k} (-1)^{k+j} \rho^{k-j} \frac{k!\,(k+s)!}{j!\,(k-j)!\,(k+s-j)!}$$

حيث : $s = 2\ell + 1$.

تسمى السلسلة (6.18) بكثيرة حدود (Laguerre) "لاغير" ويرمز لها ب Q_k^s كما يمكن أن نكتب بالصيغة المغلقة التالية :

$$u = Q_k^s = e^{\rho} \rho^{-s} \frac{d^k}{d\rho^k} \left(e^{-\rho} \rho^{k+s} \right) \qquad (6.19)$$

وهكذا نكتب الحل العام للمعادلة (6.5) بالشكل :

$$R_{n\ell}(\rho) = C_{n\ell}\, e^{-\rho/2} \rho^{\ell}\, Q_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho) \qquad (6.20)$$

حيث $\rho = 2\sqrt{A}\, r$ ، فاذا علمنا أن $n = B/\sqrt{A}$ أي أن : $A = B^2/n^2$ ،
$B = mZe^2/\hbar^2$ نجد :

$$A = \frac{m^2 Z^2 e^4}{n^2 \hbar^4} \Rightarrow 2\sqrt{A} = \frac{2 m Z e^2}{n \hbar^2} \qquad (6.21)$$

وبالتالي فان ρ تصبح :

$$\rho = \frac{2 m Z e^2}{n \hbar^2} r = \frac{2Z}{na} r \qquad (6.22)$$

حيث :

$$a = \frac{\hbar^2}{m e^2} \qquad (6.23)$$

وهو ما يسمى نصف قطر مدار " بور " الأول . وأخيراً يحسب الثابت $C_{n\ell}$ من شروط التنظيم فنجد :

$$C_{n\ell} = \left(\frac{Z}{na}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{4}{n(n-\ell-1)!\,(n+\ell)!}} \qquad (6.24)$$

وبالتالي يمكن أن نكتب القسم القطري $R(r)$ للتابع الموجي Ψ بالشكل:

$$R_{n\ell} = \left(\frac{Z}{na}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{4}{n(n-\ell-1)!\,(n+\ell)!}} \left(\frac{2Zr}{na}\right)^{\ell} e^{-\frac{Zr}{na}}\, Q_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2Zr}{na}\right) \qquad (6.25)$$

ولحساب القيم الخاصة للطاقة ننطلق كما هو معلوم من الشروط الحدية للتابع الموجي، تلك الشروط المعبر عنها رياضيا بالعلاقة (6.16). فاذا بدلنا كلاً من A ، B بقيمتهما المحسوبة سابقًا نجد :

$$\frac{B}{\sqrt{A}} = \frac{\frac{mZe^2}{\hbar^2}}{\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}} = \frac{mZe^2}{\hbar\sqrt{-2mE}} = n \qquad (6.26)$$

ومنـــه :

$$E_n = -\frac{Z^2e^2}{2an^2} = -\frac{R\hbar Z^2}{n^2} \qquad (6.27)$$

حيث R ثابت ريدبرغ وقيمته :

$$R = \frac{me^4}{2\hbar^3} \qquad (6.28)$$

وكما نلاحظ فان هذه الطاقة تتعلق فقط بالعدد الكمي الرئيســـي $n = k + l + 1$ ولا تتعلق بالعددين l و m، وفي الوقت نفسه فان التابع الموجي $\Psi_{nlm} = R_{nl} Y_l^m$ يتعلق بكل الأعداد الكمية n, l, m، وهذا يعني أن سويات الطاقة منطبقة، ودرجة انطباقها يمكن تعرف بسهولة بملاحظة أن العدد m يتحول من $-l$ الى $+l$ وأن l نفسه يتحول من 0 (أصغر قيمة لـ l تقابل أكبر قيمة لـ K ، لأن مجموعها ثابت يساوي $n-1$) الى $n-1$ (أكبر قيمة لـ l تقابل أصغر قيمة لـ K) فدرجة الانطباق هي :

$$\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{+l} m = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = \frac{1}{2}\left[1 + 2(n-1) + 1\right] = n^2 \qquad (6.29)$$

وهكذا نجد أن كل السويات الطاقية للجسيم المتحرك في حقل مركـــزي تكون منطبقة بالعدد المغناطيسي m وهذا الانطباق مرتبط بتساوي

كل الاتجاهات المارة من مركز الاحداثيات (انظر الفصل الرابـــع)، ويجب التأكيد هنا أنه لايوجد انطباق بالعدد الكمي l، في نظريـــــة شرودنغر الا في حالة الحقل المركزي الكولوني ، وفي معظم الحـــالات فان الانطباق بـ l غير وارد ويلاحظ انقسام السوية ذات الرقم n الى n تحت سوية (*sous couche*) تقابل تغير l من $n-1$ (قيمة n). فاذا وجدت الذرة بالاضافة الى ذلك في حقل مغناطيسي فان الانطباق بالعدد الكمي m سيزول أيضاً وتنقسم كل من السويات السابقة الى عدد من تحت السويات ، مجموعها يساوي n وبالتالي فان العدد الكلـــي لسويات الطاقة الجديدة سيصبح $n.n = n^2$ سوية منفصل بعضها عـــن بعـــــض .

43 ـ مبدأ الانتقاء ، طيف اشعاع الذرات الشبيهة بالهيدروجين :

لايجاد مبدأ الانتقاء يجب حساب العناصر المصفوفية :

$$\langle n,l,m|\vec{r}|n',l',m'\rangle = \int \Psi^{*}_{n'l'm'}\ \vec{r}\ \Psi_{n,l,m}\ dV \qquad (6.30)$$

حيث Ψ_{nlm} هو التابع الموجي للالكترون حول النواة وهو مؤلف مـــن قسمين زاوي وقطري وقد رأينا أن القسم الأول هو نفسه لكل الحركات في الحقل المركزي ويمكننا استناداً من مبدأ الانتقاء المتعلق بــه اذا كتبنا (6.30) بالشكل :

$$\langle n,l,m|\vec{r}|n',l',m'\rangle = \int d\Omega\, Y^{*m'}_{l'}\ \frac{\vec{r}}{r}\ Y^{m}_{l} \int_0^\infty R_{n'l'}\, r^3 R_{nl}\ dr \qquad (6.30)'$$

ولاحظنا أن مركبات المتجه $\vec{r}$ هي : $r\sin\theta\cos\varphi\ ,\ r\sin\theta\sin\varphi\ ,\ r\cos\theta$ وانتقلنا الى الاحداثيات ξ , η فاننا سنحصل على نتائج الفصل السابق نفسها للعددين الكميين m , l وهي : $\Delta l = l - l' = \pm 1\ ,\ \Delta m = m - m' = 0 , \pm 1$ نبدل هذه القيم في $(6.30)'$ فنجد :

$$\langle n,l,m|\vec{r}|n',l',m'\rangle = \text{Const.} \begin{Bmatrix} \delta_{m'm} \\ \delta_{m',m\pm 1} \end{Bmatrix} \delta_{l',l\pm 1} \int_0^\infty R_{n',l\pm 1}\, r^3 R_{nl}\ dr \qquad (6.31)$$

أما التكامل الأخير فيصبح بعد تبديل التابع القطري بقيمته من الشكل :

$$I = \int_0^\infty r^3 R_{n'l'} R_{nl}\, dr \sim \int_0^\infty r^{3+2l\pm1} e^{-\frac{Zr}{a}\left(\frac{1}{n}+\frac{1}{n'}\right)} Q_k^l\left(\frac{2Zr}{na}\right) Q_k^{l\pm1}\left(\frac{2Zr}{na}\right) dr \qquad (6.32)$$

حيث Q هو كثيرة حدود (Laguerre) المعطاة بالعلاقة (6.19) أو (6.18)، ولحساب I يجب تبديل Q بقيمتها فنحصل على جداء لكثيرتي حدود في تابع أسي ، ويمكن التأكد بسهولة أن I لايساوي الصفر من أجل أي قيمة لـ n'، فنستنتج أن مبدأ الانتقاء بالنسبة للعدد الكمي الرئيسي n غير محدد أي أن n' يمكن تأخذ أي قيمة أصغر من n في حالة الاشعاع الذاتي (self spontaneous radiation) الذي سندرسه بالتفصيل الآن ولذلك سنستعمل فيما يلي الرمز : $(-E_{nl}/\hbar) = (nl)$ حيث $n = 1, 2, 3, \ldots$ وبالنسبة الى l فقد اصطلحنا في الفصل السابق على كتابة الأحرف $s, p, d, f, g, h, \ldots$ التي تقابل $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5 \ldots$ على الترتيب وبما أن : $n \geq l + 1$ حسب (6.16) فان الرموز الممكنة هي : $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, 5s, 5p, 5d, 5f, 5g, \ldots$

وهكذا نرى الرموز 1p أو 2d أو 3f أو 2f غير ممكنة لأنه في الحالة الأولى تكون $n = l = 1$ وفي الثانية $n = l = 2$ وفي الثالثة $n = l = 3$ وفي الرابعة تكون $l = 3$ ، $n = 2$ وهذا غير ممكن حسب (6.16)، لننتقل الى حساب تواتر الاشعاع ولذلك نستخدم الرمز السابق فنكتب :

$$\omega_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} = (n'l') - (nl) \qquad (6.33)$$

ومن الضروري هنا ملاحظة أن $l' = l \pm 1$ فاذا عبرنا عن E بقيمتها من (6.27) نجد :

$$(nl) = \frac{me^4}{2\hbar^3} \frac{Z^2}{n^2} = \frac{RZ^2}{n^2} \qquad (6.34)$$

حيث R ثابتة ريدبرغ ، ثم من (6.33) نحسب $\omega_{nn'}$:

$$\omega_{nn'} = RZ^2\left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad (6.35)$$

ومن هنا نجد أنه من أجل القيمة $Z = 1$ الموافقة لذرة الهيدروجين يمكن الحصول على سلسلة ليمان (*Liman*) المقابلة للانتقال الى السوية الأساسية $n' = 1$ أي الى السوية $1S$ التي تواترها :

$$\omega_L = (1S) - (nP) = R\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad (6.36)$$

حيث : $n = 2, 3, 4, \ldots$

أما من أجل سلسلة بالمر (*Balmer*) الموافقة للانتقال الى السوية الثانية $n' = 2$ من سويات أعلى ($n > 2$) فنجد ثلاثة تواترات فقط (بعد ملاحظة أن l يمكن أن تزداد أو تنقص واحدا في هذا الانتقال) :

$$\left.\begin{aligned} \omega'_B &= (2S) - (nP) \\ \omega''_B &= (2P) - (nS) \\ \omega'''_B &= (2P) - (nd) \end{aligned}\right\} \quad (6.37)$$

الا أن كل السويات التي لها العدد n نفسه ستكون منطبقة بالعدد الكمي l كما رأينا في الحالة العامة (6.29) . ولذلك فان الخطوط الطيفية الثلاثة المقابلة ستكون متحدة في خط واحد هو الخط الطيفي المقابل للتواتر :

$$\omega_B = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \quad (6.38)$$

وأخيراً عندما يتم الانتقال الى السوية الثالثة $n' = 3$ فسيكون $n > 3$

وسنحصل على التواتـــر :

$$w_{Pac} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

(6.39)

ونسمي هذه الخطوط الطيفية المقابلة للتواترات السابقة بسلسلة باشن (Pachen) والسلاسل الثلاثة السابقة موضحة على الشكل (6.2) حيث كتبت أطوال الموجات الموافقة بالانغشتروم والكمون اللازم اعطـــاؤه للالكترون حتى ينفصل عن النواة (كمون التأين) .

44 ـ تصحيح النتائج السابقة عندما تحسب حركة النواة ـ تطبيقات:

لقد استندت الدراسة السابقة الى قوانين الحقل المركزي باعتبار أن كتلة الجسم الجاذب لانهائية لذلك كان يجب اجراء تصحيح ناتـج عن كون النواة ليست جسمًا لانهائي الكتلة بالنسبة الى الالكترون . لهذا يجب أن تطبق قوانين الميكانيك الكلاسيكي التي تبرهن أن الحركة بالنسبة لجسمين تؤول الى حركة جسم واحد واقع في حقل الثاني على أن نأخذ بدلاً من الكتلة m الكتلة المختزلة μ (masse réduite) حيث: $\mu = mM/(m+M)$ اذا اعتبرنا أن كتلة m الالكترون ، M كتلة النـواة فيمكن كتابة μ على الشكل :

(6.40)

$$\mu = \frac{m}{1+\frac{m}{M}} = m \left(1 - \frac{m}{M} \right)$$

وبالتالي فان ثابت ريدبـرغ المعطى بالعلاقة (6.28) سيتغير أيضـا ويصبح :

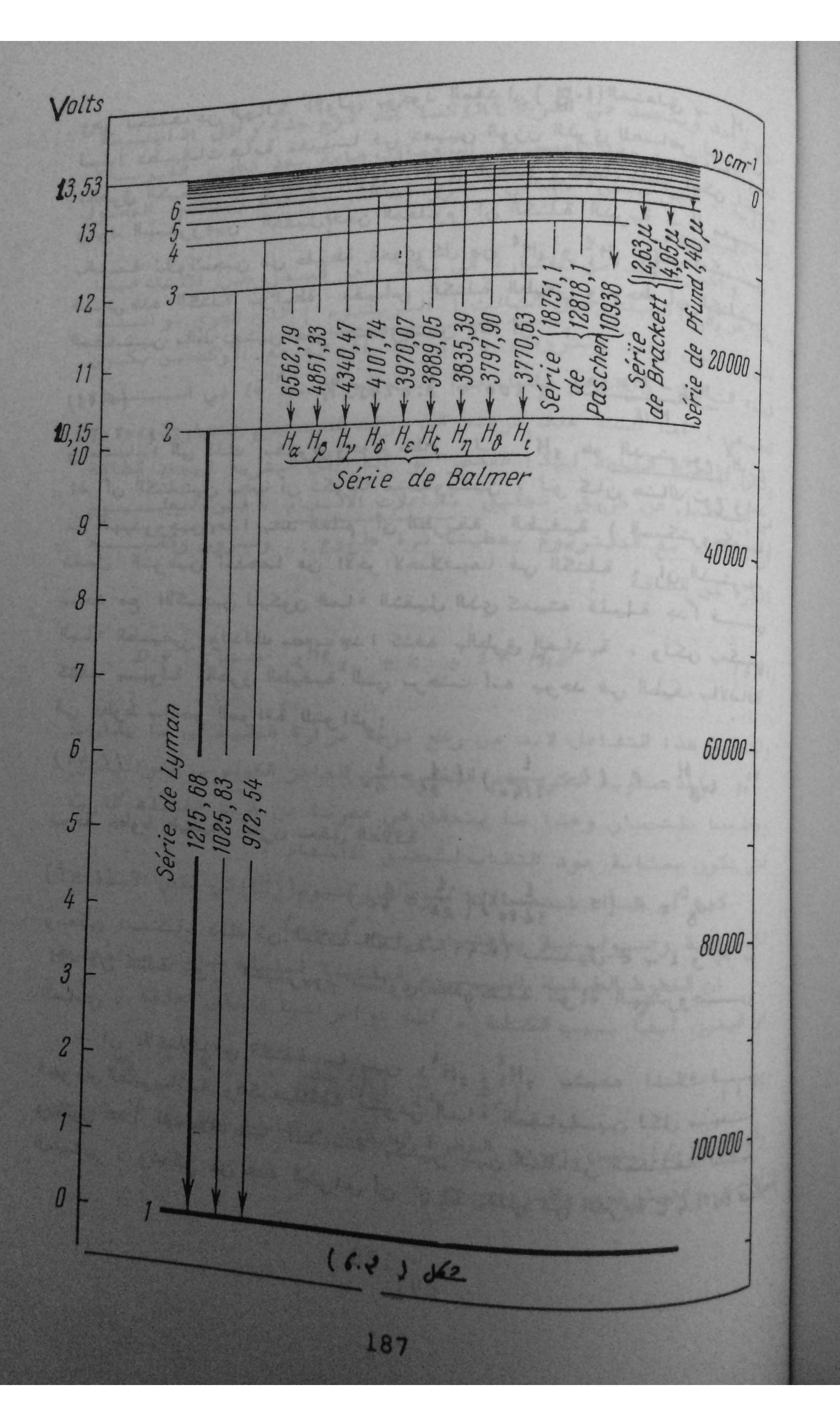
(6.41)

$$R_M = \frac{\mu e^4}{2\hbar^3} = R \left(1 - \frac{m}{M} \right)$$

ونتيجة لذلك سيتغير أيضا الرمز (nl) ليصبح (nl) يساوي :

(6.42)

$$(nl) = \frac{Z^2 R}{n^2} \left(1 - \frac{m}{M} \right)$$



Volts
ν cm⁻¹
13,53
13
12
11
10,15
10
9
8
7
6
5
4
3
2
1
0
20000
40000
60000
80000
100000
6562,79
4851,33
4340,47
4101,74
3970,07
3889,05
3835,39
3797,90
3770,63
18751,1
12818,1
10938
Série de Paschen
2,63 μ
4,05 μ
7,40 μ
Série de Brackett
Série de Pfund
Hα Hβ Hγ Hδ Hε Hζ Hη Hθ Hι
Série de Balmer
1215,68
1025,83
972,54
Série de Lyman

شكل (6.2)

وهو يختلف عن الحالة الأولى بوجود المقدار $(1 - \frac{m}{M})$ المتعلق بـ M.

لهذا تطبيقات هامة تفيدنا في تعيين الوزن الذري للعناصر ليس فقط بالطرق الكيميائية وانما بطرق أخرى طيفية وبفضل ذلك أمكن اثبات وجود الهيدروجين الثقيل، فمن المعلوم أن الكتلة الذرية لـ H معينة بالنسبة للأوكسجين من خليطة تحوي كل من ${}_1H^1$ و ${}_1H_1^2$ وقد أمكن قياس هذه الكتلة بواسطة مقياس الكتلة الطيفي ولوحظ أن الكتلتين المقاستين بالطريقتين غير متساويتين اذ أن :

$$\frac{M_{ch} - M_{M.sp}}{M_{ch}} \times 100 = 0.0145\ \% \qquad (6.43)$$

واستناداً الى ذلك نفترض وجود نظير لـ ${}_1H^1$ هو الديتريوم $D = {}_1H_1^2$ اذ أن الكتلتين يجب أن تكونا متساويتين ، لو كان هناك نوع واحد من الهيدروجين، هذا بعد العلم أن الطريقة الطيفية (السبكتروسكوبية) تفصل النوعين أحدهما عن الآخر لاختلافهما في الكتلة . ان الديتريوم يتحد مع الأكسجين ليكون الماء الثقيل الذي كميته قليلة جداً في الماء الطبيعي ولذلك يصعب جدا كشفه بالطرق العادية ، ولكن يمكن كشفه بسهولة بالطرق الطيفية التي برهنت أنه يوجد في الطيف بالاضافة الى خطوط بالمر الموافقة للتواتر:

$$\omega_B^H = R\left(1 - \frac{1}{1840}\right)\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (6.44)$$

يوجد خطوط طيفية أخرى تحقق العلاقة :

$$\omega_B^D = R\left(1 - \frac{1}{3680}\right)\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (6.45)$$

ويمكن استنتاج ذلك من العلاقة العامة (6.43) بتبديل Z بـ 1 و M بـ 2M لأن كتلة نواة الديتريوم تساوي ضعفي كتلة نواة الهيدروجين العادي .

ان الاختلاف في الكتلة ما بين ${}_1H^1$ ، ${}_1H_1^2$ يتبعه اختلاف في الخواص الفيزيائية والكيميائية لنوعي الماء المقابلين لكل منهما ويكون هذا الاختلاف هنا أشد منه بكثير بين النظائر المختلفة لبقية العناصر ، ونذكر من هذه الخواص أن D_2O يغلي في الدرجة $t = 101.4\,°C$ [illegible]

جوي واحد ويتجمد في الدرجة $3.82°C$ كما أنه لزج جداً وأقل اذابة للملح العادي ، وقد أصبح له استعمالات هامة بعد تطوير الفيزياء النووية ، فهو مبطيء مثالي للنترونات السريعة كما يستخدم للحصول على الديتريوم .

وأخيراً لابد من الاشارة الى نظير آخر للهيدروجين اكتشف فيما بعد هو $T \equiv {}_1H_2^3$ الهيدروجين الثالث (التريتيوم) الذي تحوي نواته على بروتون واحد ونترونين والذي عند اتحاده مع الأوكسجين يكون الماء الثالث T_2O وهو قليل جداً لاتتجاوز نسبته 10^{-18} في الماء الطبيعي ، أما نسبة عدد ذراته الى ذرات الديتريوم فتساوي $(1/6800)$ ولكن الأهمية الخاصة لهذا العنصر هو أنه أمل البشرية لايجاد الطاقة في المستقبل عن طريق تحقيق تفاعلات الالتحام ، فمن المعلوم أن تفاعله مع الديتريوم يعطينا ذرة هليوم ونترون وكمية كبيرة من الطاقة :

$$D + T \longrightarrow {}_2He_2^4 + n + 17\ MeV \qquad (6.46)$$

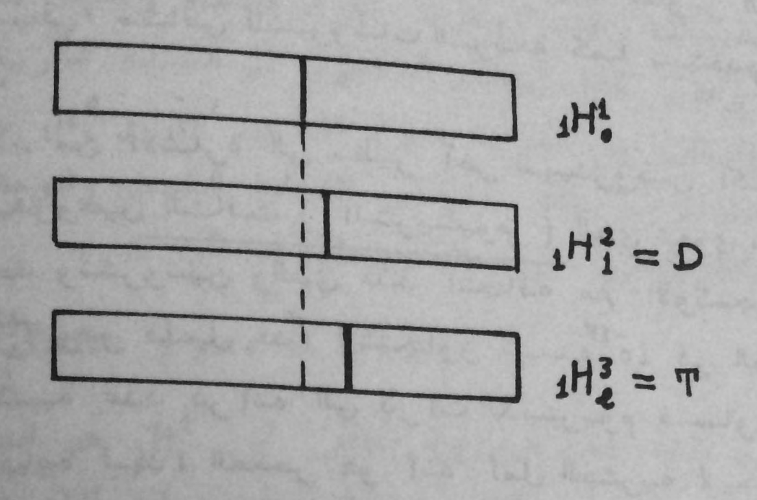
ولتحقيق هذا التفاعل لابد من رفع درجة حرارة الخليط الى ما يقارب 10^{+8} درجة مئوية لكي يتم التغلب على الحاجز الكولوني للنواتين وجعلهما تلتحمان وهذا ما يتحقق في عصرنا عن طريق القنبلة الذرية التي تكون بمثابة عود الثقاب لتحقيق الالتحام .

كما أن هناك استعمالات أخرى للتريتيوم $({}_1H_2^3)$ في بعض الأبحاث الكيميائية والبيولوجية باعتباره عنصراً مشعاً .

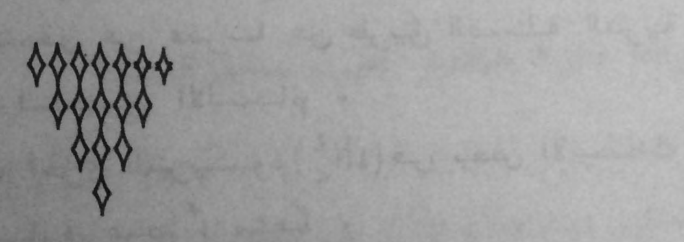
ان الخطوط الطيفية للتريتيوم المقابلة لسلسلة بالمر مزاحة الى اليمين أيضاً بسبب الكتلة . أما تواتراتها فتحقق العلاقة :

$$W_B^T = R\left(1 - \frac{1}{5520}\right)\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (6.47)$$

والشكل (6.3) يبين موضع الخطوط الطيفية المقابلة لكل من الهيدروجين العادي والديتريوم والتريتيوم .



شكل (6.3)



مسائل الفصل السادس

1 - يتحرك الكترون ضمن حقل كهربائي لنواة شحنتها Ze بحيث تكون طاقته الكلية سالبة $E<0$. برهن أن هذا الالكترون يجب أن يتحرك ضمن المجال $r_1 \leq r \leq r_2$ حيث r_1 ، r_2 أصغر بعد واكبر بعد،على الترتيب عن مركز النواة الذي يعتبر مركزاً للاحداثيات .

2 - لتكن ذرة الهيدروجين الموجودة في الحالة الأساسية $(n = 1)$ ، احسب :

آ - احتمال وجود الكترون هذه الذرة ضمن كرة قطرها a حيث a نصف قطر مدار بور الأول .

ب - احتمال وجود الالكترون خارج هذه الكرة . ثم أحسب نسبة هذين الاحتمالين مع العلم أن التابع الموجي الذي يصف الالكترون في هذه الحالة هو : $\psi_{100} = (1/\sqrt{\pi a^3})\ e^{-r/a}$.

3 - ليكن الكترون ذرة الهيدروجين الواقع على مدار محدد بالعدد الكوانتي $n = 2$ في الحالة p والمطلوب :

آ - أحسب متوسط المقدار $1/r^3$ حيث r بعد الالكترون في مركز النواة .

ب - اذا فرضنا أن الحقل المغناطيسي الناتج عن دوران الالكترون السابق يعطى بالعلاقة الكلاسيكية : $\hat{B} = \frac{e}{mc}\ \frac{1}{r^3}\ (\vec{r} \times \hat{p})$

فأحسب متوسط هذا الحقل في مركز النواة .

4 - يرمز للقسم القطري للتابع الموجي الذي يصف ذرة الهيدروجين بالرمز R_{nl} (n العدد الكمي الرئيسي ، l العدد الكمي المداري).

آ - ماهي التوابع الممكنة اذا كان $n = 1, 2, 3$.

ب - أحسب النهاية العظمى للكثافة الاجمالية $D = r^2 R^2$ لتوضح الالكترون حول نواة ذرة الهيدروجين في الحالة $1s, 2p, 3d$ وبرهن انها تقع على أبعاد a_0 ، $4a_0$ ، $9a_0$ على الترتيب من مركز النواة .

5 - ليكن التابع الموجي لذرة الهيدروجين المميز بالاعداد الكوانتية l ، m حيث $l = n-1$ ، $m = l$ (حالة خاصة). فاذا علمت أن كلاً

من القسم القطري والقسم الزاوي يعطيان بالعلاقتين ، (على الترتيب) :

$$R_{nl} = e^{-r/na_0}\left[c_0 r^l + c_1 r^{l+1} + \dots + c_{n-l-1} r^{n-1} \right]$$

$$Y_l^l \equiv |l, l\rangle = A \sin^l\theta \; e^{il\varphi}$$

حيث c_i و A ثوابت ، فاحسب :

آ ـ قيمتي كل من r و θ التي من أجلها يكون الاحتمال القطري والزاوي على الترتيب ، لوجود الالكترون حول النواة أعظمياً .

ب ـ المناطق التي تكون فيها كثافة الاحتمال $|\psi_{nlm}|^2$ أعظمية .

6 ـ أحسب ثابت التنظيم c للتابع الذي يصف الكترون ذرة الهيدروجين في الحالة الأساسية $1s$ مع العلم أن هذا التابع يعطى بالعلاقة: $\psi = c\, e^{-r/a_0}$

7 ـ أحسب مركبات كثافة التيار الاحتمالي لالكترون ذرة الهيدروجين في الحالة العامة .

8 ـ ليكن الكترون ذرة الهيدروجين في الحالة الأساسية $(n = 1)$.

آ ـ أحسب قيمة r التي يكون من أجلها احتمال وجود الالكترون أعظمياً ، ثم أحسب قيمة هذا الاحتمال على بعد $\frac{3a_0}{2}$ من مركز النواة. ما هو البعد الذي ينعدم عنده الاحتمال المذكور ؟

ب ـ برهن أن علاقات الشك $\Delta r \Delta p$ تتحقق من أجل هذه الحالة الأساسية .

ج ـ عين النقط التي يكون فيها احتمال وجود الالكترون في المستوى xz أعظمياً في الحالات $2s$ و $2p$ عندما تكون $m = \pm 1$.

9 ـ أحسب القسم القطري من التابع الموجي الذي يصف ذرة الهيدروجين من أجل $n = 1, 2, 3$ وبرهن أنك تحصل على ما يلي :

$$R_{10} = 2N e^{-\rho/2}, \quad R_{20} = \frac{1}{2\sqrt{2}} N e^{-\rho/2}(2-\rho), \quad R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}} N e^{-\rho/2}\rho$$

$$R_{30} = \frac{1}{9\sqrt{3}} N e^{-\rho/2}(6 - 6\rho + \rho^2), \quad R_{31} = \frac{1}{9\sqrt{6}} N e^{-\rho/2}\rho(4-\rho)$$

$$R_{32} = \frac{1}{9\sqrt{30}} N e^{-\rho/2}\rho^2$$

حيث $N = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}, \; \rho = \frac{2Zr}{na_0}$ ثم برهن أن كل هذه التوابع تحقق الشرط

$$\int R^*_{n'l'}(r)\, r^2 R_{nl}(r)\, dr = \delta_{nn'}\,\delta_{ll'}$$

10 ـ أحسب متوسط الكمون الذي يتأثر به الالكترون في الحالة الأساسية لذرة الهيدروجين.

الفصل السابع

الحركة في حقل مغناطيسي - سبين الالكترون

45 - مقدمــــــــه :

لقد وجدنا عند دراستنا لذرة الهيدروجين أن مجموعة الأشعة $\{|n,\ell,m_\ell\rangle\}$ (حيث : n العدد الكمي الرئيسي ، ℓ العدد الكمي المداري ، m العدد الكمي المغناطيسي) ، تصف حالة الجملة تماماً . ويمكن دراسة طيف هذه الذره أو الذرات الأخرى وتفسير وجودها نظرياً استناداً الى هذه الأشعة ، ولكن مع التطور التقني الكبير للتحليل الطيفي وجد : أولاً أن للخطوط الطيفية عرضاً كبيراً نوعاً ما وليس كما هو متوقعاً أن يقابل الفوتون المنطلق،عند انتقال الجملة من حالة الى أخرى ، طول موجة وحيد، أي خطاً طيفياً ضيقاً جداً، وثانياً أن الكثير من خطوط الطيف ، التي يبدو أنها تتجاوب مع أحد أطوال الموجة هي في الحقيقة موءلفة من عدد من الخطوط القريبة بعضها من بعض ،يمكن فصل هذه الخطوط بتطبيق حقل تحريض مغناطيسي على الجملة. تدعى ظاهرة فصل الخطوط الطيفية بتطبيق حقل تحريض مغناطيسي بمفعول زيمان (Effet Zeeman) نسبة الى العالم الهولندي زيمان الذي لاحظها عام (1896).

سنقوم في البداية بتفسير كون خطوط الطيف عريضة . في الحقيقة اذا تحددت سوية طاقة الألكترون الأولية وسوية طاقته النهائية، فان الفرق بينهما يكون محدداً تماماً، ولكن انتقال الألكترون بين سويتي الطاقة يعني اخلالاً في الاستقرار . بفرض أن Δt الزمن الذي يمضيه الألكترون في الذرة وهو في حالة الاستقرار. ان Δt يرتبط بطاقة الانتقال ΔE بعلاقة عدم التعيين لهايزنبرغ :

$$\Delta E \, \Delta t \sim \hbar \Rightarrow \Delta E \sim \hbar / \Delta t \qquad (7.1)$$

فكلما كانت فترة استقرار الألكترون في الذرة صغيرة كانت خطوط الطيف الضوئي ، التي تناظر انتقاله من حالة الى أخرى ، أعرض. بذلك نكون قد فسرنا سبب كون خطوط الطيف عريضة ، أما سبب كون الخطوط الطيفية موءلفة من عدد من الخطوط القريبة بعضها من بعض فيعود الى ادخال مفهوم كمي بحت هو السبين الذي برهن على وجوده بتجربة شترن - غيرلاخ التي سندرسها في الفقرة التالية .

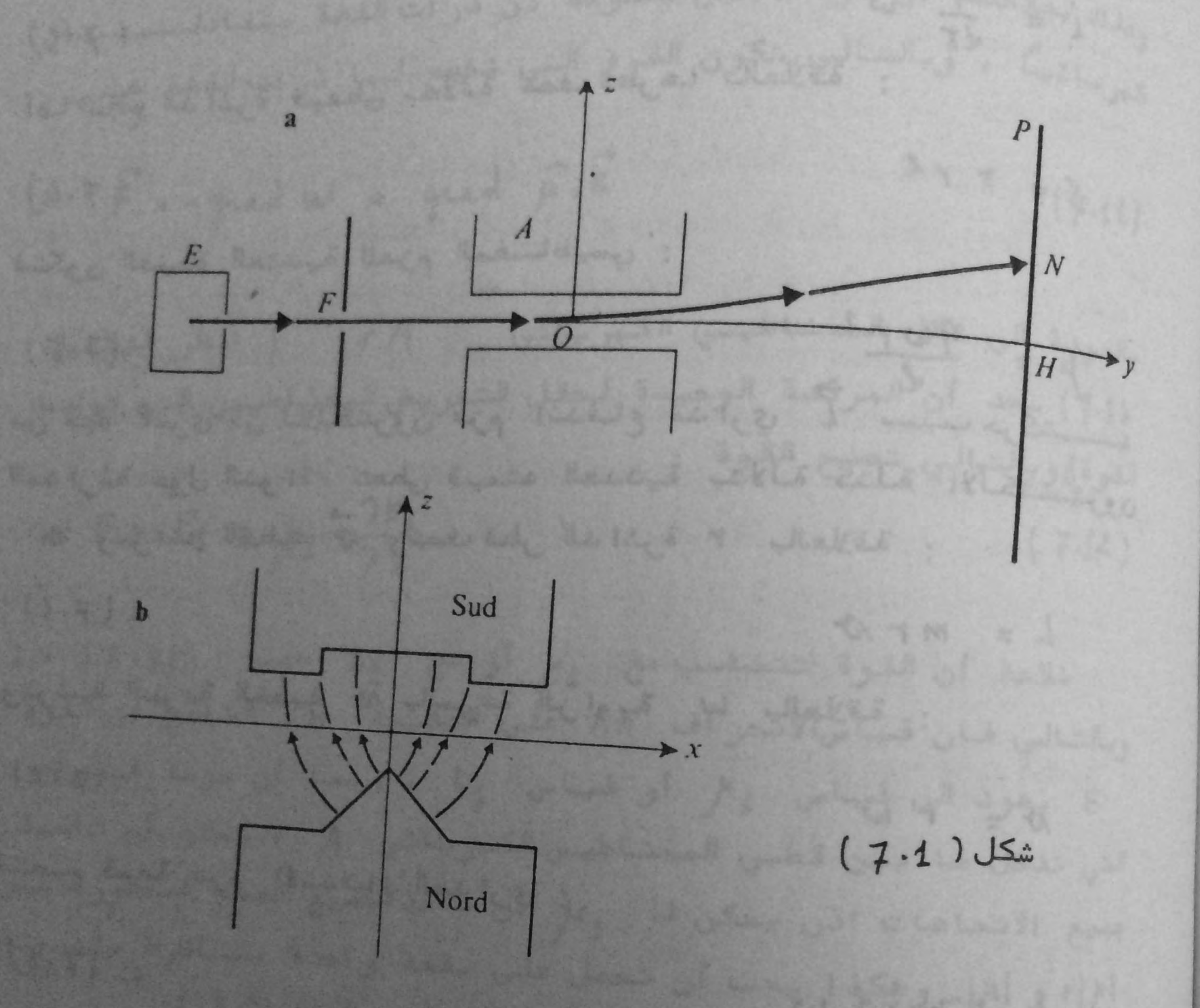
46 - تجربة شترن - غيرلاخ (Stern-Gerlach)

تدرس تجربة شترن - غيرلاخ انحراف حزمة من الذرات المتعادلة كهربائيا ذات المغنطة الطردية (ذرات الفضة Ag) تحت تأثير حقل تحريض مغناطيسي غير متجانس .

بتسخين الوعاء E ، الذي يحوي ذرات الفضة، الى درجة حرارة عالية ، تخرج هذه الذرات من ثقب صغير فيه وتوجه وفق المحور oy بواسطة فتحة F ، ومن ثم تمرر بين قطبي مغناطيسي كهربائي A لتسقط أخيراً على الصفيحة P ، انظر الشكل (7.1a).

يجب أن نوضح هنا أن للمغناطيس الكهربائي A مستوى تناظر (المستوى xoy في تجربتنا) وأن أقطابه موازية تماماً للمحور oy (أي أن حقل التحريض المغناطيسي ليس له مركبة على المحور oy). يبيّن الشكل (7.1b) خطوط حقل التحريض المغناطيسي $\vec{B}$ حيث أن مركبة B_z (حسب المحور oz) تتغير بشدة .

قبل أن نعطي نتيجة التجربة لنحاول أن نتوقعها باستخدام النظرية الكلاسيكية .



شكل (7.1)

47 - دراسة كلاسيكية :

تولد حركة الألكترون الدورانية ، حول النواة في الذرة ، عزماً مغناطيسياً $\vec{\mu}$ لهذه الذرة مساوياً الى شدة التيار i الناتج عن حركة الألكترون مضروباً في سطح الدائرة s التي يرسمها أثناء حركة :

$$\vec{\mu} = i \cdot s \cdot \vec{n} \qquad (7.2)$$

حيث $\vec{n}$ الناظم على سطح الدائرة. وتعطى شدة التيار بدلالة سرعة الحركة الزاوية w والشحنة q بالعلاقة :

$$i = \frac{q}{2\pi} \omega \qquad (7.3)$$

أما سطح الدائرة فيعطى بدلالة نصف قطرها بالعلاقة :

$$S = \pi r^2 \qquad (7.4)$$

فتكون القيمة العددية للعزم المغناطيسي :

$$\mu = \frac{q \omega r^2}{2} \qquad (7.5)$$

من جهة أخرى ان للالكترون عزم اندفاع مداري $\vec{L}$ بسبب حركته المدارية حول النواة، تعطى قيمته العددية بدلالة كتلة الالكترون m وسرعته الخطيه $\vec{v}$ ونصف قطر الدائرة r بالعلاقة :

$$L = m r v \qquad (7.6)$$

وترتبط السرعة الخطية v بالسرعة الزاوية w بالعلاقة :

$$v = r w \qquad (7.7)$$

فتصبح قيمة عزم الاندفاع المداري :

$$L = m r^2 w \qquad (7.8)$$

بمقارنة العلاقتين (7.5) و (7.8) نجد أنه يمكننا كتابة العزم المغناطيسي μ بدلالة عزم الاندفاع المداري L :

$$\mu = \frac{q}{2m} L = \gamma L = \frac{\mu_B}{\hbar} L \qquad (7.9)$$

تسمى $\gamma = \frac{q}{2m}$ النسبة الجيرومغناطيسية، ويسمى $\mu_B = \frac{q\hbar}{2m}$ مغنيتون بور (Magnéton de Bohr).

تتأثر ذرات الفضة، التي تتواجد في حقل تحريض مغناطيسي بقوة مشتقة من طاقة كامنة W حيث :

$$W = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \qquad (7.10)$$

$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$ قوة لورنتز

وذلك بملاحظة أن قوة لابلاس معدومة لأن ذرات الفضة متعادلة كهربائياً ، وبالتالي تكون القوة التي تخضع لها ذرات الفضة هي :

$$\vec{F} = -\text{grad}\, W = \text{grad}\, \vec{\mu} \cdot \vec{B} \qquad (7.11)$$

بالعودة الى شكل المغناطيسي الكهربائي A ، (انظر الشكل 7.1b) نجد أن المركبة الوحيدة لحقل التحريض المغناطيسي التي تولد القوة B_z وبالتالي تصبح القوة :

$$F = F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \qquad (7.12)$$

نلاحظ أن القوة تتناسب مع μ_z أو مع L_z حسب (7.9) ، وبالتالي فان قياس الانحراف HN على الصفيحة P الناتج عن القوة F يعود الى قياس μ_z أو قياس L_z ، وبما أن حزمة الذرات، التي تدخل ما بين قطبي المغناطيس الكهربائي A ، يمكن أن تأخذ جميع الاتجاهات اذن يمكن لـ μ_z أن تأخذ جميع القيم المحصورة بين $|\mu|+$ و $|\mu|-$ وهكذا يجب أن نحصل على بقعة واحدة متناظرة بالنسبة للنقطة H . وهذا ما يوضحه الخط المنقط في الشكل (7.2) .

P, N_1, H, N_2

شكل (7.2)

يتجه العزم المغناطيسي $\vec{\mu}$ لذرات الفضة الخارجة من الوعاء E في جميع الاتجاهات وبشكل عشوائي لذلك فان الميكانيك الكلاسيكي يتوقع أن قياس μ_z يعطي وباحتمالات متساوية جميع القيم المحصورة بين $|\mu|+$ و $|\mu|-$ ،وهكذا يجب أن نحصل على بقعة واحدة متمركزة في H (الخط المنقط)، ولكن نتيجة التجربة تعطينا بقعتين متمركزتين في N_1 و N_2 (الخط المتصل) .

48 - دراسة كوانتيــــــة :

ان نتائج التجربة ، التي أجريت للمرة الأولى من قبل شتــــرن وغيرلاخ عام 1922، مناقضة لتوقعات الميكانيك الكلاسيكي ، فبدلاً من ملاحظة بقعة واحدة متمركزة في H، فاننا نلاحظ بقعتين متمركزتين في N_1 و N_2 (الخط المتصل في الشكل 7.2) .

لقد فشل الميكانيك الكلاسيكي في توقعاته لنتائج تجربة شترن وغيرلاخ ، فلنبحث فيما اذا كان باستطاعة ميكانيك الكم تفسيرها.

وجدنا سابقا أن الطاقة الكامنة للذرات بوجود حقل تحريــــض مغناطيسي تعطى بالعلاقة :

$$\hat{W} = -\mu_z B_z = -\frac{q}{2m} B_z \hat{L}_z = \frac{e B_z}{2m} \hat{L}_z \qquad (7.13)$$

حيث $q=-e$ شحنة الالكترون ، وبالتالي فان الهاملتوني الكلّي للجملة $\hat{H}$ هـــو :

$$\hat{H} = \hat{H}_n + \hat{W} = \hat{H}_n + \frac{e B_z}{2m} \hat{L}_z \qquad (7.14)$$

حيث يمثل $\hat{H}_n$ هاملتوني الجملة قبل تطبيق حقل التحريض المغناطيسي.

ان مجموعة الموءثرات $\{\hat{H}_n, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ تقبل التبادل فيما بينها مثنــى مثنى وهذا يعني أن لها مجموعة كاملة من الأشعة الخاصة المشتركة وهي: $\{|n, l, m_l\rangle\}$ اذن فهي أشعة خاصة للهاملتوني الكلّي للجملة $\hat{H}$:

$$\hat{H}|n, l, m_l\rangle = \left(\hat{H}_n + \frac{e B_z}{2m} \hat{L}_z\right)|n, l, m_l\rangle = \left(E_n + \frac{e B_z}{2m} m_l \hbar\right)|n, l, m_l\rangle \qquad (7.15)$$

مقابلة للقيم الخاصة :

$$E_{n,m_\ell} = E_n + \frac{eB_z}{2m} m_\ell \hbar \qquad (7.16)$$

حيث E_n سويات طاقة ذرة الفضة في حالة غياب حقل التحريض المغناطيسي .

نعلم انه من أجل قيمة معينة للعدد الكمي الرئيسي n فان العدد الكمي المداري ℓ يأخذ n قيمة مختلفة هي: $\ell = 0, 1, \cdots, n-1$ حيث $|\Delta \ell| = 1$ ، وأن العدد الكمي المغناطيسي m_ℓ يأخذ $(2\ell+1)$ قيمة مختلفة من أجل قيمة معينة لـ ℓ : $-\ell \leq m_\ell \leq +\ell$ و $|\Delta m| = 1$.

اذن من أجل قيمتين معينتين لـ n و ℓ فان سوية الطاقة (7.16) ستنقسم الى $(2\ell+1)$ سوية جزئية يقابل كل منها قيمة ممكنة لـ m_ℓ.

نعلم أيضا أن الانتقال بين حالتين كموميتين مختلفتين يخضع لقواعد الانتقاء $\Delta \ell = \pm 1$ و $\Delta m = 0, \pm 1$ وذلك مهما يكن العددان الكميان الرئيسيان n و n' المميزان للحالتين . وهذا يقتضي بأن مفعول زيمان يوءدي الى انقسام الخط الطيفي ، الناتج عن انتقال الجملة بين السويتين E_f و E_i ذي التواتر $\omega = (E_f - E_i)/\hbar$ الى ثلاث مركبات تواتراتها الزاوية هي كما يلي في الشكل (7.3) :

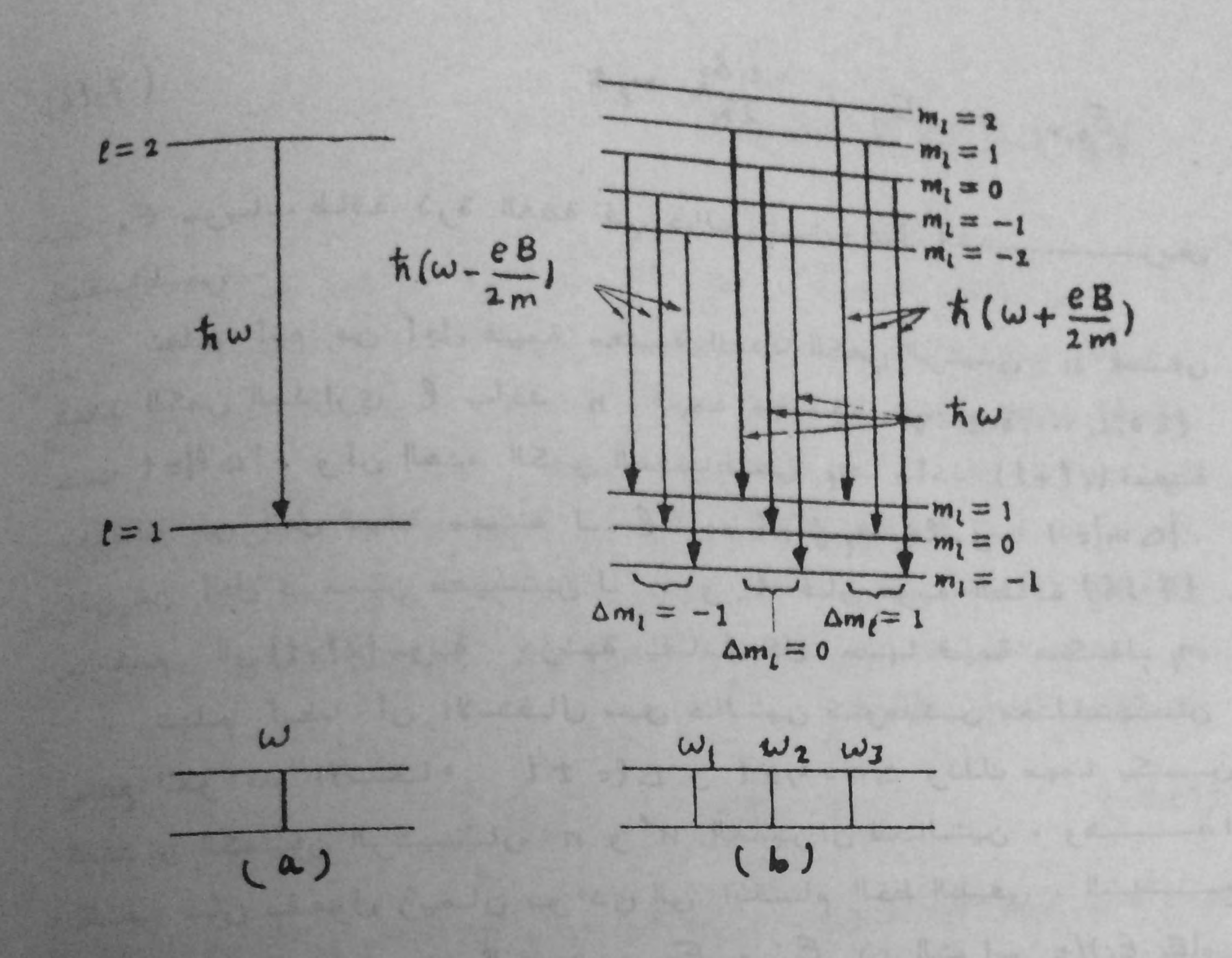
$$\omega_1 = \omega + \frac{eB_z}{2m} \qquad (7.17a)$$

$$\omega_2 = \omega \qquad (7.17b)$$

$$\omega_3 = \omega - \frac{eB_z}{2m} \qquad (7.17c)$$

انقسام الخطوط الطيفية

لقد تم تجريبياً ملاحظة مفعول زيمان : لدى وضع الذرة في حقل تحريض مغناطيسي ، ولكن يمكن في كثير من الأحيان ظهور أربع أوست أو أكثر من المركبات الطيفية بدلاً من ظهور ثلاث مركبات كما تتوقع النظرية الكمومية ، وحتى في حالة ظهور ثلاث مركبات فان المسافات الفاصلة بينها لاتتفق مع العلاقات



شكـــل (7.3)

انقسام الخط الطيفي بوجود حقل تحريض مغناطيسي من أجل $l=2, l=1$.
a) الطيف بغياب الحقل، b) الطيف بوجود الحقـــل .

(7.17). بالاضافة الى ذلك فانه حتى ولو لم نطبق حقل تحريـــض مغناطيسي على الذرة ، فاننا نلاحظ أن الخطوط الطيفية للذرات شبه الهيدروجينية والقلوية لاتتفق مع النظرية، حيث تتوقع النظرية وجود خطوط طيفية مفردة $(n=1,\ l=m_l=0)$، ولكن نلاحظ أن معظم الخطـوط الطيفية مزدوجة وتتركب من خطين منفصلين قريبين جداً أحدهما مـن الآخر مثل الخطين الأصفرين في طيف الصوديوم (Na) وهما يوافقـــان طولي موجة مقدارهما $\lambda_1 = 5890\ \AA$ و $\lambda_2 = 5896\ \AA$.

49 – محاولة ترميم النظرية الكمومية – مسلمات باولي :

لقد فشلت النظرية الكمومية ، كما رأينا سابقا ، في تفسير

مفعول زيمان ، وفي محاولة للخروج من هذه المشكلة فقد اقترح اوهلينبيك وغود شميت (Uehelenbeck et Goudsmit) عام 1925 الفرضية التالية :

يدور الالكترون حول نفسه (من الانكليزية : to spin) .

وهذا الدوران يكسبه عزما حركيا ذاتيا نسميه السبين ونرمز له بالحرف $\vec{S}$.

ولتفسير النتائج التجريبية نقبل بانه يرتبط بالعزم الحركي السبيني $\vec{S}$ عزم مغناطيسي سبيني $\vec{\mu}_s$ معطى بالعلاقة :

$$\vec{\mu}_s = 2\,\frac{\mu_B}{\hbar}\,\vec{S} \qquad (7.18)$$

بمقارنة العلاقتين (7.9) و (7.18) نلاحظ أن العزم المغناطيسي السبيني $\vec{\mu}_s$ يساوي ضعفي العزم المغناطيسي المداري μ * .

لقد أوضح باولي (Pauli) هذه الفرضية وأعطى للسبين وصفا كموميا في حدود النظرية الكمومية غير النسبية وذلك بوضعه مجموعة من المسلمات ، وهكذا يجب أن يضاف الى مسلمات ميكانيك الكم التي اعطيت سابقا ، المتعلقة بالموضع $\vec{r}$ وبالاندفاع $\vec{P}$ ، مسلمات باولي التالية التي تتعلق بالسبين .

المسلمة (1)

ان الموءثر $\hat{\vec{S}}$ هو عبارة عن عزم حركي ذاتي ، هذا يعني أن مركباته على المحاور الاحداثية $\hat{S}_x$ ، $\hat{S}_y$ ، $\hat{S}_z$ تحقق علاقات التبادل التالية :

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \qquad (7.19a)$$

$$[S_y, S_z] = i\hbar S_x \qquad (7.19b)$$

$$[S_z, S_x] = i\hbar S_y \qquad (7.19c)$$

---

*) عندما ندرس التفاعل بين الالكترون والحقل الكهرطيسي المكمم ، في الالكتروديناميك الكمومي ، فاننا نجد أن ثابت التناسب بين $\vec{\mu}_s$ و $\vec{S}$ يختلف بمقدار 10^{-3} عن $2\mu_B/\hbar$.

المسلمة (2)

يشكل المؤثران $\hat{S}_z$ ، $\hat{S}^2$ مجموعة كاملة من الملحوظات الفيزيائية التي تقبل التبادل فيما بينها في فضاء السبين المكون من الأشعة الخاصة المشتركة لكل منهما ولتكن $\{|s, m_s\rangle\}$ ،ويحققان العلاقتين التاليتين :

$$\hat{S}^2 |s, m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2 \; |s, m_s\rangle \tag{7.20a}$$

$$\hat{S}_z |s, m_s\rangle = m_s \hbar \; |s, m_s\rangle \tag{7.20b}$$

وحسب النظرية العامة للعزم الحركي فان s يمكن أن تكون اما عدداً صحيحاً أو نصف عدد صحيح ، وأن m_s تأخذ جميع القيم المحصورة بين $s+$ و $s-$ بحيث يكون الفرق بين قمتين متتاليتين لها هو الواحد ($-s \leq m_s \leq s$ و $\Delta m_s = 1$) . نستطيع اذن أن نميز جسيماً ما بالعدد s فنقول أنه جسيم ذو سبين s . وهكذا يتكون الفضاء السبيني من $(2s+1)$ حالة . هذه الحالات عبارة عن أشعة خاصة للمؤثر $\hat{S}^2$ تقابل القيمة الخاصة نفسها : $s(s+1)\hbar^2$.

المسلمة (3)

ان فضاء الحالات للجسيم هو عبارة عن الجداء التنسوري لفضاء التوابع التربيعية المكاملة والفضاء السبيني وبذلك يكون الشعاع الممثل للجسيم في هذا الفضاء هو :

$$|n, l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle = |n, l, m_l, s, m_s\rangle \tag{7.21}$$

هذا يعني أيضا أن كل ملحوظ فيزيائي سبيني يقبل التبادل مع أي ملحوظ فيزيائي مداري .

المسلمة (4)

ان للالكترون سبينا مساويا نصف $(s = 1/2)$ وعزماً مغناطيسياً

سبينياً معطى بالعلاقة (7.18).

50 – عودة الى تجربة شترن – غيرلاخ :

يجب أن نلاحظ أولاً أن العزم الحركي الكلّي لذرة الفضة يساوي العزم السبيني للالكترون الخارجي $s = 1/2$ ، وهكذا استناداً الى هذه الملاحظة والى مسلمات باولي يضاف الى الهاملتوني (7.14) الطاقة الكامنة $\hat{V}_s$ الناتجة عن العزم الحركي الذاتي وهي :

$$\hat{V}_s = \frac{e B_z}{m} \hat{S}_z \qquad (7.22)$$

وبالتالي فان الهاملتوني الكلّي يصبح :

$$\hat{H}' = \hat{H}_n + \hat{W} + \hat{V}_s = \hat{H}_n + \frac{e B_z}{2m} (\hat{L}_z + 2 \hat{S}_z) \qquad (7.23)$$

وتصبح معادلة شرودنغر (7.15) :

$$\hat{H}' | n, l, m_l, s, m_s \rangle = [\hat{H}_n + \frac{e B_z}{2m} (\hat{L}_z + 2 \hat{S}_z)] | n, l, m_l, s, m_s \rangle =$$

$$= [E_n + \hbar \frac{e B_z}{2m} (m_l + 2 m_s)] | n, l, m_l, s, m_s \rangle \qquad (7.24)$$

بالانتباه الى أن $s = 1/2$ فان $m_s = \pm 1/2$ فان الطاقة (7.16) تؤول الى :

$$E_{n, m_l, m_s} = E_n + \frac{e B_z \hbar}{2m} (m_l \pm 1) \qquad (7.25)$$

وأخيراً فان وجود حقل التحريض المغناطيسي سيؤدي الى انقسام سوية الطاقة الدنيا لذرات الفضة ($n = 1, l = m_l = 0, s = 1/2, m_s = \pm 1/2$) الى سويتين تقابلان البقعتين في تجربة شترن – غيرلاخ :

$$E_{1, 0, 1/2} = E_n + \frac{e B_z \hbar}{2m} \qquad (7.26a)$$

$$E_{1,0,-1/2} = E_n - \frac{eB_z\hbar}{2m} \tag{7.26b}$$

51 ـ بعض خواص الجمل ذات السبين $s = 1/2$:

وجدنا سابقاً أن سبين الالكترون $s = 1/2$، وهذا يعني أن $m_s = \pm 1/2$
وهكذا فان فضاء الحالات السبينية $\{|s, m_s\rangle\}$ مكوّن من شعاعين
هما :

$$|1/2, 1/2\rangle \; , |1/2, -1/2\rangle \tag{7.27}$$

تشكل مجموعة أشعة فضاء الحالات السبينية قاعدة منظمة ومتعامدة :
أي أنها تحقق علاقات التنظيم وعلاقات المعامدة وعلاقة الاغلاق
التالية على الترتيب :

$$\langle 1/2, 1/2 | 1/2, 1/2\rangle = \langle 1/2, -1/2 | 1/2, -1/2\rangle = 1 \tag{7.28a}$$

$$\langle 1/2, 1/2 | 1/2, -1/2\rangle = \langle 1/2, -1/2 | 1/2, 1/2\rangle = 0 \tag{7.28b}$$

$$|1/2, 1/2\rangle\langle 1/2, 1/2| + |1/2, -1/2\rangle\langle 1/2, -1/2| = 1 \tag{7.28c}$$

وتصبح العلاقات (7.20) في حالة الالكترون بالشكل :

$$\hat{S}^2 |1/2, \pm 1/2\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2 |1/2, \pm 1/2\rangle \tag{7.29a}$$

$$\hat{S}_z |1/2, \pm 1/2\rangle = \pm \frac{1}{2}\hbar |1/2, \pm 1/2\rangle \tag{7.29b}$$

نعرّف موءثري التكوين والفناء $\hat{S}_\pm$ بالشكل :

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\,\hat{S}_y \tag{7.30}$$

حيث أن تأثيرهما على الشعاع $|s, m_s\rangle$ هو :

$$\hat{S}_{\pm} |s, m_s\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} \; |s, m_s \pm 1\rangle \tag{7.31}$$

وهكذا فان تأثيرهما على أشعة القاعدة (7.27) هو :

$$\hat{S}_{+} |1/2, 1/2\rangle = 0 \tag{7.32a}$$

$$\hat{S}_{+} |1/2, -1/2\rangle = \hbar |1/2, 1/2\rangle \tag{7.32b}$$

$$\hat{S}_{-} |1/2, 1/2\rangle = \hbar |1/2, -1/2\rangle \tag{7.32c}$$

$$\hat{S}_{-} |1/2, -1/2\rangle = 0 \tag{7.32d}$$

يتكون فضاء الحالات السبينية من الشعاعين (7.27) اذن يمثل كل موءثر في هذا الفضاء بمصفوفة مربعة (2X2) ، ونستطيع ايجاد المصفوفات الممثلة لمركبات $\hat{S}$ على المحاور الاحداثية استناداً الى العلاقات (7.30) و (7.32) و (7.29b) وهي:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} |1/2, 1/2\rangle \\ |1/2, -1/2\rangle \end{matrix} \tag{7.33a}$$

$$\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} |1/2, 1/2\rangle \\ |1/2, -1/2\rangle \end{matrix} \tag{7.33b}$$

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{matrix} |1/2, 1/2\rangle \\ |1/2, -1/2\rangle \end{matrix} \tag{7.33c}$$

بمقارنة هذه المصفوفات مع مصفوفات باولي التالية :

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{7.34a}$$

$$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{7.34b}$$

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.34c}$$

m_s

نستطيع أن نكتب $\hat{S}$ بدلالة $\hat{\sigma}$ (مركبات $\hat{\sigma}$ على المحـــاور الاحداثية هي مصفوفات باولي) بالشكل :

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma} \qquad (7.35)$$

من الجدير بالذكر أنه في حالة كتابة الموءشرات بشكل مصفوفات فان أشعتها الخاصة تكون مصفوفة من عمود واحد (2×1) . لنرمـــز بـ α_1 و α_2 للشعاعين الخاصين للموءشر $\hat{S}_z$ المقابلين للقيم الخاصة $\hbar/2$ و $-\hbar/2$ على الترتيب ، يمثل هذان الشعاعان بالشكل المصفوفـــي بالشكل :

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad (7.36a)$$

$$\alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (7.36b)$$

يسمى كل عمود من الشكل (7.36) سبينور ، يجب الاشارة هنا الى أن كل عمود من هذه الأعمدة معيّن الى ثابت ضرب كيفي $e^{i\theta}$ حيث θ عدد حقيقي . ويمكن ايجاد جميع السبينورات المتعلقة بموءشرات فضـــاء الحالات السبينية .

سنورد الآن بعض خواص مصفوفات باولي وهي :

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = 1 \qquad (7.37)$$

$$\hat{\sigma}_k\hat{\sigma}_l + \hat{\sigma}_l\hat{\sigma}_k = 2\delta_{kl} \quad :(k,l = x,y,z) \qquad (7.38)$$

$$[\hat{\sigma}_k, \hat{\sigma}_l] = 2i\delta_{klm}\hat{\sigma}_m \quad :(k,l,m = x,y,z) \qquad (7.39)$$

حيث أدخلنا الاصطلاح :

$$\delta_{klm} = \begin{cases} +1 & \text{اذا كانت الأدلة مرتبة دوريًا} \\ -1 & \text{اذا كانت الأدلة غير دورية} \\ 0 & \text{اذا تساوي دليلان أو أكثر} \end{cases} \qquad (7.40)$$

(مخطط: $k \to l \to m$ ، $+$)

بالاضافة الى ذلك فان آثار هذه المصفوفات معدومة :

$$S_p\ \hat{\sigma}_x = S_p\ \hat{\sigma}_y = S_p\ \hat{\sigma}_z = 0 \qquad (7.41)$$

ومعيناتها تساوي 1- :

$$\mathrm{Det}\ \hat{\sigma}_x = \mathrm{Det}\ \hat{\sigma}_y = \mathrm{Det}\ \hat{\sigma}_z = -1 \qquad (7.42)$$

52 - تركيب سبينين 1/2 :

بفرض أنه لدينا جملة مكونة من جسيمين لهما السبين نفسه $s_1 = s_2 = 1/2$، هكذا فان $m_{s1} \equiv m_1 = \pm 1/2$ و $m_{s2} \equiv m_2 = \pm 1/2$ ، وليكن $\hat{S}_1$ موءثر السبين للجسيم الأول و $\hat{S}_2$ موءثر السبين للجسيم الثاني ، بفرض أن $\mathcal{E}_s(1)$ فضاء الحالات السبينية المتعلقة بالجسيم (1) عندما يكون بمفرده ، وأن مجموعة الأشعة $\{|s_1, m_1\rangle\}$ تشكل قاعدة منظمة ومتعامدة فيه ، ان العلاقات التالية محققة :

$$\hat{S}_1^2 |s_1, m_1\rangle = s_1(s_1+1)\hbar^2 |s_1, m_1\rangle \qquad (7.43a)$$

$$\hat{S}_{1z} |s_1, m_1\rangle = m_1 \hbar |s_1, m_1\rangle \qquad (7.43b)$$

وبالمثل بفرض أن $\mathcal{E}_s(2)$ فضاء الحالات السبينية المتعلقة بالجسيم (2) عندما يكون بمفرده وأن مجموعة الأشعة $\{|s_2, m_2\rangle\}$ تشكل قاعدة منظمة ومتعامدة فيه ، ان العلاقات التالية محققة :

$$\hat{S}_2^2 |s_2, m_2\rangle = s_2(s_2+1)\hbar^2 |s_2, m_2\rangle \qquad (7.44a)$$

$$\hat{S}_{2z} |s_2, m_2\rangle = m_2 \hbar |s_2, m_2\rangle \qquad (7.44b)$$

ان الموءثرات التي تتعلق بالجسيم الأول تقبل التبادل مع جميع الموءثرات المتعلقة بالجسيم الثاني وهكذا فان علاقات التبادل التالية

محققة :

$$[\hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2] = [\hat{S}_1^2, \hat{S}_{13}] = [\hat{S}_1^2, \hat{S}_{23}] = 0 \qquad (7.45a)$$

$$[\hat{S}_2^2, \hat{S}_{23}] = [\hat{S}_2^2, \hat{S}_{13}] = [\hat{S}_{13}, \hat{S}_{23}] = 0 \qquad (7.45b)$$

وهذا يقتضي بأن مجموعة الموءثرات $\{\hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2, \hat{S}_{13}, \hat{S}_{23}\}$ تشكل مجموعة كاملة من الملحوظات الفيزيائية التي تقبل التبادل فيما بينها مثنى مثنى . وبذلك يكون فضاء الحالات السبينية للجملة الكلّية $\mathcal{E}_S$ هوالجداء التنسوري للفضاءين $\mathcal{E}_S(1)$ و $\mathcal{E}_S(2)$:

$$\mathcal{E}_S = \mathcal{E}_S(1) \otimes \mathcal{E}_S(2) \qquad (7.46)$$

نعلم من جهة أخرى أن عناصر القاعدة في $\mathcal{E}_1(1)$ و $\mathcal{E}_S(2)$ هي على التوالي :

$$\{|S_1, m_1\rangle\} = \{|1/2, 1/2\rangle, |1/2, -1/2\rangle\} \qquad (7.47)$$

$$\{|S_2, m_2\rangle\} = \{|1/2, 1/2\rangle, |1/2, -1/2\rangle\} \qquad (7.48)$$

نلاحظ أن القاعدتين متطابقتان تماماً ، لذلك نضيف الدليل (1) للقاعدة (7.47) والدليل (2) للقاعدة (7.48) ونحذف لتسهيل الكتابة S_1 و S_2 فتصبح القاعدتان على الشكل :

$$\{|1 : m_1\rangle\} = \{|1 : 1/2\rangle ; |1 : -1/2\rangle\} \qquad (7.49)$$

$$\{|2 : m_2\rangle\} = \{|2 : 1/2\rangle , |2 : -1/2\rangle\} \qquad (7.50)$$

وتكون القاعدة في $\mathcal{E}_S$ هي الجداء التنسوري للقاعدتين في $\mathcal{E}_1(1)$ و $\mathcal{E}_S(2)$ ولنرمز لها بالشكل $|m_1, m_2\rangle$ فتكون :

$$|m_1, m_2\rangle = |1 : m_1\rangle \otimes |2 : m_2\rangle \qquad (7.51)$$

وهكذا فان العنصر الأول من الشعاع $|m_1, m_2\rangle$ متعلق بالجسم (1) والعنصر الثاني من الشعاع نفسه متعلق بالجسم (2) ،بذلك تكون القاعدة في مكونة من أربعة أشعة : $(2S_1+1)(2S_2+1) = 4$ وهي:

$$|1/2, 1/2\rangle = |1 : 1/2\rangle \otimes |2 : 1/2\rangle \quad (7.52a)$$

$$|1/2, -1/2\rangle = |1 : 1/2\rangle \otimes |2 : -1/2\rangle \quad (7.52b)$$

$$|-1/2, 1/2\rangle = |1 : -1/2\rangle \otimes |2 : 1/2\rangle \quad (7.52c)$$

$$|-1/2, -1/2\rangle = |1 : -1/2\rangle \otimes |2 : -1/2\rangle \quad (7.52d)$$

ومن الجدير بالذكر أن القاعدة $\{|m_1, m_2\rangle\}$ منظمة ومتعامدة :

نعرف السبين الكلي $\hat{S}$ لجملة الجسيمين بالعلاقة :

$$\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2 \quad (7.53)$$

تكون مركباته على المحاور الاحداثية هي :

$$\hat{S}_k = \hat{S}_{1k} + \hat{S}_{2k} \quad : \quad (k = x, y, z) \quad (7.54)$$

يبرهن بسهولة على أن $\hat{S}$ يمثل عزما حركيا ، في الحقيقة لنحسب مبدل $\hat{S}_x$ و $\hat{S}_y$ على سبيل المثال :

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = [\hat{S}_{1x} + \hat{S}_{2x}, \hat{S}_{1y} + \hat{S}_{2y}] =$$
$$= [\hat{S}_{1x}, \hat{S}_{1y}] + [\hat{S}_{1x}, \hat{S}_{2y}] + [\hat{S}_{2x}, \hat{S}_{1y}] + [\hat{S}_{2x}, \hat{S}_{2y}] =$$
$$= i\hbar \hat{S}_{1z} + 0 + 0 + i\hbar S_{2z} =$$
$$= i\hbar (\hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}) =$$
$$= i\hbar \hat{S}_z \quad (7.55)$$

بالطريقة نفسها نستطيع البرهان على صحة العلاقتين التاليتين:

$$[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar \hat{S}_x \quad (7.56)$$
$$[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar \hat{S}_y \quad (7.57)$$

يمكننا الحصول على $\hat{S}^2$ بتربيع العلاقة (7.53) :

$$\hat{S}^2 = (\hat{S}_1 + \hat{S}_2)^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{S}_1\hat{S}_2 \qquad (7.58)$$

حيث تكتب $\hat{S}_1\hat{S}_2$ بدلالة S_{1x} و S_{2x} و S_{1z} و S_{2z} بالشكل:

$$\hat{S}_1\hat{S}_2 = \hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z} =$$

$$= \frac{1}{2}(\hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+}) + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z} \qquad (7.59)$$

بملاحظة أن كلاً من $\hat{S}_1$ و $\hat{S}_2$ يقبلان التبادل مع كل من $\hat{S}_1^2$ و $\hat{S}_2^2$ وبالعودة الى التعريف (7.53) نجد أن جميع مركبات العزم السبيني الكلي للجملة تقبل التبادل مع كل من $\hat{S}_1^2$ و $\hat{S}_2^2$ وبشكل خاص فان كلاً من $\hat{S}^2$ و $\hat{S}_z$ يقبلان التبادل معهما :

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_1^2] = [\hat{S}^2, \hat{S}_2^2] = 0 \qquad (7.60a)$$

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_1^2] = [\hat{S}_z, \hat{S}_2^2] = 0 \qquad (7.60b)$$

من جهة أخرى فان $\hat{S}_z$ يقبل التبادل مع كل من $\hat{S}_{1z}$ و $\hat{S}_{2z}$ حسب (7.54) :

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_{1z}] = [\hat{S}_z, \hat{S}_{2z}] = 0 \qquad (7.61)$$

ولكن $\hat{S}^2$ لايقبل التبادل مع أي من $\hat{S}_{1z}$ و $\hat{S}_{2z}$ ، في الحقيقة واعتماداً على (7.58) :

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_{1z}] = [\hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{S}_1\hat{S}_2, \hat{S}_{1z}] =$$

$$= [\hat{S}_1^2, \hat{S}_{1z}] + [\hat{S}_2^2, \hat{S}_{1z}] + 2[\hat{S}_1\hat{S}_2, \hat{S}_{1z}] =$$

$$= 2[\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}, \hat{S}_{1z}] =$$

$$= i\{[\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x}, \hat{S}_{1z}] + [\hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y}, \hat{S}_{1z}] + [\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}, \hat{S}_{1z}]\}$$

$$= i\{[\hat{S}_{1x}, \hat{S}_{1z}]\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1x}[\hat{S}_{2x}, \hat{S}_{1z}] + [\hat{S}_{1y}, \hat{S}_{1z}]\hat{S}_{2y} +$$

$$+ \hat{S}_{1y}[\hat{S}_{2y}, \hat{S}_{1z}] + [\hat{S}_{1z}, \hat{S}_{1z}]\hat{S}_{2z} + \hat{S}_{1z}[\hat{S}_{2z}, \hat{S}_{1z}]\}$$

$$= i(-i\hbar\hat{S}_{1y}\hat{S}_{2x} + i\hbar\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2y}) =$$

$$= i\hbar(-\hat{S}_{1y}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1x}\hat{S}_{2y}) \qquad (7.61)$$

وهكذا فان مجموعة المؤشرات $\{\hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2, \hat{S}^2, \hat{S}_z\}$ تشكل مجموعة كاملة من الملحوظات الفيزيائية التي تقبل التبادل فيما بينها مثنى مثنى، لنرمز بـ$\{|S, m_s\rangle\}$ لمجموعة الأشعة الخاصة المشتركة لها، تختلف هذه المجموعة من الأشعة عن مجموعة الأشعة (7.52) لان $\hat{S}^2$ لايقبل التبادل مع كل من $\hat{S}_{1z}$ و $\hat{S}_{2z}$ ، وهي تحقق العلاقات التالية :

$$\hat{S}_1^2|S, m_s\rangle = \hat{S}_2^2|S, m_s\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|S, m_s\rangle \qquad (7.63a)$$

$$\hat{S}^2|S, m_s\rangle = S(S+1)\hbar^2|S, m_s\rangle \qquad (7.63b)$$

$$\hat{S}_z|S, m_s\rangle = m_s\hbar|S, m_s\rangle \qquad (7.63c)$$

لقد برهنا سابقاً أن $\hat{S}$ عزم حركي وبالتالي فان S اما ان يكون عدداً صحيحاً أو نصف صحيح وتأخذ m_s جميع القيم المحصورة بين $+S$ و $-S$ بحيث يكون $\Delta m_s = 1$ ،سنوجد الآن مجموعة الأشعة $\{|S, m_s\rangle\}$، وهي أربعة أشعة : $4 = (2S_1+1)(2S_2+1)$، بدلالة الأشعة $\{|m_1, m_2\rangle\}$. ينتج من التعريف (7.53) أن S تأخذ القيم $S_1+S_2 \geq S \geq |S_1 - S_2|$ حيث $\Delta S = 1$، هكذا فان قيم S هي : $S = 0, 1$، ففي الحالة $S = 0$ فان $m_s = 0$ وفي الحالة $S = 1$ فان $m_s = 0, \pm 1$ وهكذا فان أشعة القاعدة $\{|S, m_s\rangle\}$ هي :

$$\{|1,1\rangle , |1,0\rangle , |1,-1\rangle , |0,0\rangle\}$$

(7.64)

وجدنا سابقاً أن $\hat{S}_z$ يقبل التبادل مع كل موءثر من المجموعة $\{\hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2, \hat{S}_{1z}, \hat{S}_{2z}\}$ حسب العلاقات (7.60) و (7.61) ، هذا يعني أن أشعة القاعدة (7.52) هي أشعة خاصة لـ $\hat{S}_z$:

$$\hat{S}_z |m_1, m_2\rangle = (\hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}) |m_1, m_2\rangle =$$

$$= \hat{S}_{1z} |m_1, m_2\rangle + \hat{S}_{2z} |m_1, m_2\rangle =$$

$$= m_1 \hbar |m_1, m_2\rangle + m_2 \hbar |m_1, m_2\rangle =$$

$$= (m_1 + m_2) \hbar |m_1, m_2\rangle \qquad (7.65)$$

وهذا يعني أن $m_s = m_1 + m_2$ ، لندرس الآن الشعاع $|m_1, m_2\rangle = |1/2, 1/2\rangle$ ، ان هذا الشعاع هو شعاع خاص للموءثر $\hat{S}_z$ مقابل للقيمة الخاصة $\hbar$: $m_s = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$ ، وبالعودة الى قيم s نجد أنها يجب أن تساوي $s = 1$ ، ان الشعاع $|1/2, 1/2\rangle$ هو أيضاً شعاع خاص للموءثر $\hat{S}^2$ ، وبما أن m_s غير منطبق اذن يكون لدينا :

(7.66)

$$|1,1\rangle = |1/2, 1/2\rangle$$

نطبق الموءثر $\hat{S}_-$ على الشعاع $|1,1\rangle$ لايجاد الشعاع $|1,0\rangle$ وذلك بالاعتماد على (7.31) كما يلي :

(7.67)

$$\hat{S}_- |1,1\rangle = \hbar\sqrt{2}\, |1,0\rangle$$

فيكون الشعاع $|1,0\rangle$:

(7.68)

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} \hat{S}_- |1,1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} \hat{S}_- |1/2, 1/2\rangle$$

وبالعودة الى (7.53) نجد أن :

(7.69)

$$\hat{S}_- = \hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}$$

بتعويض (7.69) في (7.68) نجد :

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} (\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}) |1/2, 1/2\rangle =$$
$$= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} [\hat{S}_{1-} |1/2, 1/2\rangle + \hat{S}_{2-} |1/2, 1/2\rangle] =$$
$$= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} [\hbar |-1/2, 1/2\rangle + \hbar |1/2, -1/2\rangle] =$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}} [|-1/2, 1/2\rangle + |1/2, -1/2\rangle] \qquad (7.70)$$

وبتطبيق $\hat{S}_-$ على $|1,0\rangle$ نحصل على الشعاع $|1,-1\rangle$:

$$|1,-1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} \hat{S}_- |1,0\rangle =$$
$$= \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} (\hat{S}_{1-} + \hat{S}_{2-}) \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} [|-1/2, 1/2\rangle + |1/2, -1/2\rangle] \right\} =$$
$$= \frac{1}{2\hbar} [\hat{S}_{1-} |-1/2, 1/2\rangle + \hat{S}_{1-} |1/2, -1/2\rangle + \hat{S}_{2-} |-1/2, 1/2\rangle + \hat{S}_{2-} |1/2, -1/2\rangle] =$$
$$= \frac{1}{2\hbar} [\hbar |-1/2, -1/2\rangle + \hbar |-1/2, -1/2\rangle] =$$
$$= |-1/2, -1/2\rangle \qquad (7.71)$$

ولايجاد الشعاع المتعلق بقيمة $S=0$ و $m_S=0$ نلاحظ أننا نستطيع الحصول على $m_S = m_1 + m_2 = 0$ بطريقتين : في حالة $m_2 = -1/2,\ m_1 = 1/2$ والحالة $m_1 = -1/2,\ m_2 = 1/2$ ، وهكذا نفرض أن الشعاع $|0,0\rangle$ هو عبارة عن تركيب خطي للشعاعين $|-1/2, 1/2\rangle, |1/2, -1/2\rangle$ أي :

$$|0,0\rangle = \alpha |1/2, -1/2\rangle + \beta |-1/2, 1/2\rangle \qquad (7.72)$$

حيث α و β اعداد يجب تعيينها . لذلك نفرض على الشعاع $|0,0\rangle$ أن يكون منظماً :

$$\langle 0,0|0,0\rangle = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \tag{7.73}$$

وأن يكون أيضاً معامداً للأشعة الأخرى وبشكل خاص للشعاع $|1,0\rangle$:

$$\langle 1,0|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\beta) = 0 \tag{7.74}$$

بالمقارنة بين العلاقتين (7.73) و (7.74) نجد أن :

$$\alpha = -\beta = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{7.75}$$

وهكذا يكون الشعاع $|0,0\rangle$:

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1/2,-1/2\rangle - |-1/2,1/2\rangle\right] \tag{7.76}$$

ملاحظـــــات :

1 – نسمي الحالة الممثلة بالشعاع $|0,0\rangle$ حالة وحيدة (Singulet). ونسمي مجموعة الحالات ($m_s = 0,\pm 1$)، $|1,m_s\rangle$ حالات ثلاثية (Triplet).

2 – ان الحالات الثلاثية هي حالات تناظرية بالنسبة لتبديل دوّري الجسيمين بالنسبة للسبين ، أما الحالة الفردية فهي حالة لاتناظرية بالنسبة لدوّري الجسيمين بالنسبة للسبين وهذا يعني أن التابع يغير اشارته .

3 – يفضل عند دراسة جملة مكونة من جسيمين لهما السبين نفسه استخدام القاعدة $\{|S,m_s\rangle\}$ بدلا من القاعدة $\{|m_1,m_2\rangle\}$ لأن عناصرها أشعة خاصة لكل من $\hat{S}^2$ و $\hat{S}_z$ حيث نجد أن المصفوفتين الممثلتين لـ $\hat{S}^2$ و $\hat{S}_z$ هما :

$$\hat{S}^2 = 2\hbar^2\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} |0,0\rangle \\ |1,1\rangle \\ |1,0\rangle \\ |1,-1\rangle \end{matrix} \tag{7.77}$$

$$\hat{S}_z = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{matrix} |0,0\rangle \\ |1,1\rangle \\ |1,0\rangle \\ |1,-1\rangle \end{matrix} \qquad (7.78)$$

4 - يمكن حساب أشعة القاعدة $\{|S,m_s\rangle\}$ بدلالة أشعة القاعدة $\{|m_1,m_2\rangle\}$ بطريقة أخرى وذلك بحساب أثر كل من $\hat{S}^2$ و $\hat{S}_z$ على أشعة القاعدة $\{|m_1,m_2\rangle\}$ ومن ثم ايجاد المصفوفات الممثلة لهما في هذه القاعـــدة وبعد ذلك تقطير هذه المصفوفات .

53 - العزم الحركي الالكتروني الكلّي :

نعرف العزم الحركي الكلّي للالكترون $\hat{J}$ بأنه مجموع عزمـــه الحركي المداري $\hat{L}$ وعزمه السبيني $\hat{S}$.

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} \qquad (7.79)$$

وهذا يعني أن مركباته على المحاور الاحداثية هي :

$$\hat{J}_k = \hat{L}_k + \hat{S}_k \quad : \quad (k = x, y, z) \qquad (7.80)$$

ان $\hat{J}$ يمثل عزماً حركياً وهذا يقتضي بأن تحقق مركباته علـــى المحاور الاحداثية علاقات التبادل التالية :

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z \qquad (7.81a)$$

$$[\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar \hat{J}_x \qquad (7.81b)$$

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar \hat{J}_y \qquad (7.81c)$$

لنبرهن على صحة احدى العلاقـــات ويبرهن على صحة العلاقات الأخـــرى بالطريقة نفسها ، ولكن يجب الاشارة هنا ، قبل البدء بالبرهان ، الى أن كلاً العزمين الحركيين $\hat{L}$ و $\hat{S}$ يتعلقان بمتحولات مستقلـــــة ومختلفة وهكذا فان مركباتها على المحاور الاحداثية تقبل التبادل فيما بينها :

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = [\hat{L}_x + \hat{S}_x , \hat{L}_y + \hat{S}_y].$$

$$= [\hat{L}_x, \hat{L}_y] + [\hat{L}_x, \hat{S}_y] + [\hat{S}_x, \hat{L}_y] + [\hat{S}_x, \hat{S}_y].$$

$$= i\hbar \hat{L}_z + 0 + 0 + i\hbar \hat{S}_z .$$

$$= i\hbar (\hat{L}_z + \hat{S}_z) =$$

$$= i\hbar \hat{J}_z \qquad (7.82)$$

بفرض أن $\mathcal{E}_l$ فضاء الحالات المدارية للالكترون وأن مجموعة الأشعة $\{|l, m_l\rangle\}$ تشكل قاعدة منظمة ومتعامدة فيه . ان العلاقات التالية محققة :

$$\hat{L}^2 |l, m_l\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l, m_l\rangle \qquad (7.83a)$$

$$\hat{L}_z |l, m_l\rangle = m_l \hbar |l, m_l\rangle \qquad (7.83b)$$

وبالمثل نفرض أن $\mathcal{E}_s$ فضاء الحالات السبينية للالكترون وأن مجموعة الأشعة $\{|s, m_s\rangle\}$ تشكل قاعدة منظمة ومتعامدة فيه ، ان العلاقات التالية محققة :

$$\hat{S}^2 |s, m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m_s\rangle \qquad (7.84a)$$

$$\hat{S}_z |s, m_s\rangle = m_s \hbar |s, m_s\rangle \qquad (7.84b)$$

وبما أن العزم المداري $\hat{L}$ يتعلق بمتحولات مختلفة ومستقلة عن المتحولات التي يتعلق بها العزم السبيني $\hat{S}$ ، فان جميع المؤثرات المتعلقة بـ $\hat{L}$ تقبل التبادل مع جميع المؤثرات المتعلقة بـ $\hat{S}$ وبشكل خاص فان علاقات التبادل التالية محققة :

$$[\hat{L}^2, \hat{S}^2] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = [\hat{L}^2, \hat{S}_z] = 0 \qquad (7.85a)$$

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_z] = [\hat{S}^2, \hat{L}_z] = [\hat{L}_z, \hat{S}_z] = 0 \qquad (7.85b)$$

وهذا يقود الى أن مجموعة المؤثرات $\{\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z\}$ تشكل مجموعة كاملة من الملحوظات الفيزيائية التي تقبل التبادل فيما بينها مثنى مثنى وبذلك يكون فضاء الحالات الكلّي $\mathcal{E}$ هو الجداء التنسوري للفضائين $\mathcal{E}_l$ و $\mathcal{E}_s$:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_l \otimes \mathcal{E}_s \tag{7.86}$$

وتكون القاعدة في هذا الفضاء هي الجداء التنسوري للقاعدتين في كلا الفضائين :

$$|l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle = |l, s, m_l, m_s\rangle \tag{7.87}$$

ولنرمز لها اختصاراً بالشكل :

$$|m_l, m_s\rangle \equiv |l, s, m_l, m_s\rangle \tag{7.88}$$

ويكون عدد عناصر هذه القاعدة $(2l+1)(2s+1)$ وهي قاعدة منظمة متعامدة .

بالعودة الى التعريف (7.79) يمكننا الحصول على $\hat{J}^2$ بتربيع هذه العلاقة :

$$\hat{J}^2 = (\hat{L} + \hat{S})^2 =$$

$$= \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}\hat{S} \tag{7.89}$$

حيث نستطيع كتابة الجداء $\hat{L}.\hat{S}$ بدلالة $\hat{L}_z$ ، $\hat{L}_\pm$ ، $\hat{S}_z$ ، $\hat{S}_\pm$ بالشكل :

$$\hat{L}.\hat{S} = \hat{L}_x \hat{S}_x + \hat{L}_y \hat{S}_y + \hat{L}_z \hat{S}_z =$$

$$= \frac{1}{2}(\hat{L}_+ \hat{S}_- + \hat{L}_- \hat{S}_+) + \hat{L}_z \hat{S}_z \tag{7.90}$$

ان كلاً من $\hat{L}$ و $\hat{S}$ يقبل التبادل مع كل من $\hat{L}^2$ و $\hat{S}^2$ وبالعودة للتعريف (7.79) نجد أن جميع مركبات العزم الكلّي $\hat{J}$ تقبل التبادل مع كل من $\hat{L}^2$ و $\hat{S}^2$ وبشكل خاص فان كلاً من $\hat{J}^2$ و $\hat{J}_z$ يقبلان

التبادل معهما :

$$[\hat{J}^2, \hat{L}^2] = [\hat{J}^2, \hat{S}^2] = 0 \qquad (7.91a)$$

$$[\hat{J}_z, \hat{L}^2] = [\hat{J}_z, \hat{S}^2] = 0 \qquad (7.91b)$$

ومن جهة أخرى فان $\hat{J}_z$ يقبل التبادل مع $\hat{L}_z$ و $\hat{S}_z$ حسب

$$[\hat{J}_z, \hat{L}_z] = [\hat{J}_z, \hat{S}_z] = 0 \qquad (7.92)$$

ولكن $\hat{J}^2$ لايقبل التبادل مع أي من $\hat{L}_z$ و $\hat{S}_z$ في الحقيقة وبالاعتماد على (7.89) و (7.90) :

$$[\hat{J}^2, \hat{L}_z] = [\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}\hat{S}, \hat{L}_z] =$$

$$= [\hat{L}^2, \hat{L}_z] + [\hat{S}^2, \hat{L}_z] + 2[\hat{L}\hat{S}, \hat{L}_z] =$$

$$= 2[\hat{L}_x\hat{S}_x + \hat{L}_y\hat{S}_y + \hat{L}_z\hat{S}_z, \hat{L}_z] =$$

$$= 2\{[\hat{L}_x, \hat{L}_z]\hat{S}_x + \hat{L}_x[\hat{S}_x, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y, \hat{L}_z]\hat{S}_y + \hat{L}_y[\hat{S}_y, \hat{L}_z] +$$

$$+ [\hat{L}_z, \hat{L}_z]\hat{S}_z + \hat{L}_z[\hat{S}_z, \hat{L}_z]\} =$$

$$= 2[-i\hbar\hat{L}_y\hat{S}_x + i\hbar\hat{L}_x\hat{S}_y] =$$

$$= 2i\hbar[-\hat{L}_y\hat{S}_x + \hat{L}_x\hat{S}_y] \qquad (7.93)$$

وهكذا فان مجموعة المؤشرات $\{\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z\}$ تشكل مجموعة كاملة من الملحوظات الفيزيائية التي تقبل التبادل فيما بينها مثنى مثنى، لنرمز بـ $\{|l, s, j, m_j\rangle\}$ لمجموعة الأشعة الخاصة المشتركة لها ، ان هذه المجموعة تشكل قاعدة منظمة ومتعامدة وتختلف عن القاعدة (7.88) لأن $\hat{J}^2$ لايقبل التبادل مع $\hat{L}_z$ و $\hat{S}_z$ ولنرمز لها اختصاراً بالشكل :

$$|j, m_j\rangle \equiv |l, s, j, m_j\rangle \qquad (7.94)$$

ان هذه القاعدة تحقق العلاقات التالية :

$$\hat{L}^2 |j, m_j> = l(l+1)\hbar^2 |j, m_j> \qquad (7.95a)$$

$$\hat{S}^2 |j, m_j> = s(s+1)\hbar^2 |j, m_j> \qquad (7.95b)$$

$$\hat{J}^2 |j, m_j> = j(j+1)\hbar^2 |j, m_j> \qquad (7.95c)$$

$$\hat{J}_z |j, m_j> = m_j \hbar \; |j, m_j> \qquad (7.95d)$$

يمثل $\hat{J}$ عزماً حركياً وبالتالي فان j اما أن يكون عدداً صحيحاً أو نصف عدد صحيح وتأخذ m_j جميع القيم المحصورة بين $j+$ و $j-$ بحيث يكون $\Delta m_j = 1$. وحسب قواعد جمع العزوم الحركية فان j تأخذ جميع القيم المحصورة بين $|l-s|$ و $|l+s|$ بحيث يكون $\Delta j = 1$.

$$|l-s| \leq j \leq l+s \quad , \quad \Delta j = 1 \qquad (7.96)$$

ويكون عدد أشعة القاعدة $\{|j, m_j>\}_j$ هو $(2l+1)(2s+1)$.

من الجدير بالذكر أن العدد j يضاف كدليل سفلي للحرف الذي يرمز للعزم الحركي المداري l وذلك في المصطلحات الذرية والأطياف :

$$n\, l_j \qquad (7.97)$$

حيث l هو الحرف s من أجل قيمة $l=0$ وهو الحرف p من أجل قيمة $l=1$ والحرف d من أجل قيمة $l=2$ وهكذا . مثلاً نرمز للطبقات الجزئية في سوية الطاقة $n=2$ لذرة الهيدروجين بالشكل :

$$2P_{3/2} \, , \; 2P_{1/2} \, , \; 2S_{1/2}$$

مسائل الفصل السابع

١ - مسألة محلولة (I) :

أوجد هاملتوني جسيم، كتلته m وشحنته q موجود في حقل كهرطيسي، موصوف بالحقل الكهربائي $\vec{E}(\vec{r},t)$ وحقل التحريض المغناطيسي $\vec{B}(\vec{r},t)$.

الحل :

نلاحظ في البداية أن $\vec{E}$ و $\vec{B}$ يحققان معادلات مكسويل التالية:

$$\left.\begin{array}{ll} a)\ \vec{\nabla}\cdot\vec{E} = \rho/\varepsilon_0 , & c)\ \vec{\nabla}\cdot\vec{B} = 0 \\ b)\ \vec{\nabla}\times\vec{E} = -\partial\vec{B}/\partial t , & d)\ \vec{\nabla}\times\vec{B} = \mu_0\vec{j} + \varepsilon_0\mu_0\dfrac{\partial\vec{E}}{\partial t} \end{array}\right\} \quad (I.1)$$

حيث $\rho(\vec{r},t)$ الكثافة الحجمية للشحنات و $\vec{j}(\vec{r},t)$ كثافة التيار اللذان يولدان الحقل الكهرطيسي و ε_0 سماحية الخلاء الكهربائية و μ_0 نفوذية الخلاء المغناطيسية. نستطيع أن نصف الحقلين $\vec{E}$ و $\vec{B}$ بالكمونين : الشعاعي $\vec{A}(\vec{r},t)$ والسلّمي $U(\vec{r},t)$، في الحقيقة أن المعادلة (I.1c) تقتضي وجوب وجود حقل شعاعي $\vec{A}(\vec{r},t)$ بحيث يتحقق :

$$\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}(\vec{r},t) \quad (I.2)$$

وبتعويض قيمة $\vec{B}$ في العلاقة (I.1b) نجد :

$$\vec{\nabla}\times\left(\vec{E} + \frac{\partial\vec{A}}{\partial t}\right) = 0 \quad (I.3)$$

وهذا يقتضي وجوب وجود ثابت سلّمي $U(\vec{r},t)$ بحيث يتحقق :

$$\vec{E} + \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} = -\vec{\nabla}\cdot U(\vec{r},t) \quad (I.4)$$

يصف الكمونان $\vec{A}(\vec{r},t)$ و $U(\vec{r},t)$ الحقل الكهرطيسي، ونسمي مجموعتهما المعيار ونرمز له بالشكل $\{\vec{A},U\}$، ونستطيع حساب الحقلين الكهربائي والمغناطيسي اعتباراً من المعيار $\{\vec{A},U\}$ بالمعادلتين التاليتين :

$$\vec{B}(\vec{r},t) = \vec{\nabla}\times\vec{A}(\vec{r},t) \quad (I.5a)$$

$$\vec{E}(\vec{r},t) = -\vec{\nabla}U(\vec{r},t) - \frac{\partial}{\partial t}\vec{A}(\vec{r},t) \quad (I.5b)$$

يجب الاشارة هنا الى أنه نستطيع ايجاد مجموعة لانهائية من

في الحقيقـة، المعيارات المتكافئة التي تصف حقلاً كهرطيسياً معيناً . نفرض أن حقلاً كهرطيسياً ما، معيناً بالحقلين $\vec{E}$ و $\vec{B}$ اللذيـن نستطيع حسابها اعتباراً من المعيار $\{\vec{A}, V\}$ ، فان جميع المعيارات $\{\vec{A}', V'\}$ المتكافئة للمعيار $\{\vec{A}, V\}$ تُستنتج منه بواسطة معادلتي تغيير المعيار التاليتين :

$$\vec{A}'(\vec{r},t) = \vec{A}(\vec{r},t) + \vec{\nabla} W(\vec{r},t) \quad (I.6a)$$

$$V'(\vec{r},t) = V(\vec{r},t) - \frac{\partial}{\partial t} W(\vec{r},t) \quad (I.6b)$$

حيث $W(\vec{r},t)$ تابع سلّمي كيفي . وللبرهان على صحة ما أوردناه سابقاً يكفي البرهان على أن المعيارات المتكافئة تعطي الحقول الكهربائيـة المغناطيسية نفسها وأنه اذا وجد معياران متكافئان ، فيوجد حتماً تابع سلّمي $W(\vec{r},t)$ يربط بينهما بواسطة العلاقات (I.6) .

يبرهن بسهولة، في البداية، واعتباراً من العلاقات (I.5) على أن:

$$\vec{\nabla} \times \vec{A}'(\vec{r},t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r},t) \quad (I.7a)$$

$$-\vec{\nabla} V'(\vec{r},t) - \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}'(\vec{r},t) = -\vec{\nabla} V(\vec{r},t) - \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{r},t) \quad (I.7b)$$

وهنا يعني أن جميع المعيارات $\{\vec{A}', V'\}$ التي تحقق العلاقات (I.6) تعطي نفس الحقول الكهربائية والمغناطيسية التي يعطيها المعيار $\{\vec{A}, V\}$، وبالمقابل نفرض أن المعيارين $\{\vec{A}, V\}$ و $\{\vec{A}', V'\}$ متكافئان هـذا يعني أنهما يحققان ، من أجل $\vec{B}$ ، ما يلي:

$$\vec{B}(\vec{r},t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r},t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}'(\vec{r},t) \quad (I.8)$$

وهذا يعني أن :

$$\vec{\nabla} \times (\vec{A}' - \vec{A}) = 0 \quad (I.9)$$

وهذا يقتضي وجوب كون $\vec{A}' - \vec{A}$ تدرجاً لتابع سلّمي أي :

$$\vec{A}' - \vec{A} = \vec{\nabla} W(\vec{r},t) \quad (I.10)$$

ومن جهة أخرى ، ان تكافوء المعيارين $\{\vec{A}, V\}$ و $\{\vec{A}', V'\}$ يعني انهما يحققان ، من أجل $\vec{E}$ ، ما يلي :

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} V(\vec{r},t) - \frac{\partial}{\partial t}\vec{A}(\vec{r},t) = -\vec{\nabla} V'(\vec{r},t) - \frac{\partial}{\partial t}\vec{A}'(\vec{r},t) \qquad (I.11)$$

ومن العلاقة $(I.10)$ نجد :

$$\vec{\nabla}(V' - V) = -\vec{\nabla}\frac{\partial}{\partial t} W(\vec{r},t) \qquad (I.12)$$

وباختيار ثابت مناسب ينتج لدينا أن :

$$V' - V = -\frac{\partial}{\partial t} W(\vec{r},t) \qquad (I.13)$$

ان التابع السلمي $W(\vec{r},t)$ يربط بين المعيارين $\{\vec{A}, V\}$ و $\{\vec{A}', V'\}$ ، وهكذا يجب أن يحقق معياران متكافئان بالضرورة المعادلات $(I.6)$.

سنوجد الهاملتوني بدلالة الكمونين $\vec{A}$ و V بدلاً من الحقلين $\vec{E}$ و $\vec{B}$ ، اعتباراً من تابع لاغرانج .

لايجاد تابع لاغرانج ننتبه في البداية الى أن قوة لورنتز تعطى بالعلاقة :

$$\vec{F} = q\left[\vec{E} + \vec{v}\times\vec{B}\right] \qquad (I.14)$$

حيث $\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt} = \dot{\vec{r}}$ سرعة الجسيم ، يجب أن تساوي قوة نيوتن لنحصل على معادلات الحركة :

$$m\ddot{\vec{r}} = q\left[\vec{E}(\vec{r},t) + \dot{\vec{r}}\times\vec{B}(\vec{r},t)\right] \qquad (I.15)$$

باسقاط هذه المعادلة على المحور ox وبالاعتماد على المعادلات $(I.5)$ نجد :

$$m\ddot{x} = q\left[-\frac{\partial V}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{y}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right) - \dot{z}\left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}\right)\right] \qquad (I.16)$$

بالمقارنة مع هذه العلاقة نلاحظ أن تابع لاغرانج يجب ان يأخذ الشكل:

$$\mathcal{L}(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) = \frac{1}{2} m\dot{\vec{r}}^2 + q\dot{\vec{r}}\,\vec{A}(\vec{r},t) - qV(\vec{r},t) \qquad (I.17)$$

لنبرهن على أن معادلات لاغرانج تعطينا معادلات الحركة (I.15) اعتباراً من تابع لاغرانج (I.17)، في الحقيقة، تعطى معادلات لاغرانج بالشكل :

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0 \qquad (I.18)$$

حيث q_i و $\dot{q}_i$ الاحداثيات والسرع المعممة، من أجل الاحداثي x نجد:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + q\,A_x(\vec{r},t) \qquad (I.19a)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x} = q\,\dot{\vec{r}}\,\frac{\partial}{\partial x}\vec{A}(\vec{r},t) - q\frac{\partial}{\partial x}V(\vec{r},t) \qquad (I.19b)$$

بالتعويض في معادلات لاغرانج نجد :

$$\frac{d}{dt}\left[m\dot{x} + q\,A_x(\vec{r},t)\right] - q\,\dot{\vec{r}}\,\frac{\partial}{\partial x}\vec{A}(\vec{r},t) + q\frac{\partial}{\partial x}V(\vec{r},t) \qquad (I.20)$$

بتفصيل هذه العلاقة استناداً الى أن المشتق الكلّي بالنسبة للزمن هو:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^{N}\dot{q}_i\frac{\partial}{\partial q_i} + \sum_{i=1}^{N}\ddot{q}_i\frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \qquad (I.21)$$

فنجد:

$$m\ddot{x} + q\left[\frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{x}\frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y}\frac{\partial A_y}{\partial y} + \dot{z}\frac{\partial A_z}{\partial z}\right] + \qquad (I.22)$$
$$- q\left[\dot{x}\frac{\partial A_x}{\partial x} + \dot{y}\frac{\partial A_y}{\partial x} + \dot{z}\frac{\partial A_z}{\partial x}\right] + q\frac{\partial V}{\partial x} = 0$$

وبالتصحيح نجد :

$$m\ddot{x} = q\left[-\frac{\partial V}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial t} + \dot{y}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right) - \dot{z}\left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}\right)\right] \qquad (I.23)$$

وهي العلاقة نفسها (I.16) وهكذا فان تابع لاغرانج (I.17) يعطي اعتباراً من معادلات لاغرانج (I.18) معادلات الحركة (I.15) .

لنحسب الآن الهاملتوني اعتباراً من تابع لاغرانج حيث :

$$H = \sum_{i=1}^{n} p_i \dot{q}_i - \mathcal{L} \qquad (I.24)$$

حيث تعطى مركبة الاندفاع المعمم ، بدلالة الاحداثيات المعممة بالعلاقة :

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \qquad (I.25)$$

وهكذا فان مركبته على المحور x هي :

$$p_x = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} + q A_x(\vec{r},t) \qquad (I.26)$$

بالتعميم نجد أن الاندفاع المعمم $\vec{P}$:

$$\vec{P} = m\dot{\vec{r}} + q\vec{A}(\vec{r},t) \qquad (I.27)$$

يجب الملاحظة هنا أن الاندفاع المعمم لايتطابق مع كمية الحركة $m\dot{\vec{r}}$،

وهكذا نجد أن الهاملتوني:

$$H = \vec{P}\cdot\dot{\vec{r}} - \mathcal{L} =$$

$$= \vec{P}\left(\frac{\vec{P}-q\vec{A}}{m}\right) - \frac{1}{2}m\left(\frac{\vec{P}-q\vec{A}}{m}\right)^2 - q\left(\frac{\vec{P}-q\vec{A}}{m}\right)\vec{A} + q\mathcal{V} =$$

$$= \left(\frac{\vec{P}-q\vec{A}}{m}\right)\left[\vec{P} - \left(\frac{\vec{P}-q\vec{A}}{2}\right) - q\vec{A}\right] + q\mathcal{V} =$$

$$= \left(\frac{\vec{P}-q\vec{A}}{m}\right)\left(\frac{\vec{P}-q\vec{A}}{2}\right) + q\mathcal{V} =$$

$$= \frac{1}{2m}\left[\vec{P} - q\vec{A}(\vec{r},t)\right]^2 + q\mathcal{V}(\vec{r},t) \qquad (I.28)$$

وهو هاملتوني جسيم ، كتلته m وشحنته q ، موجود في حقل كهرطيسي ، موصوف بالحقلين: الكهربائي $\vec{E}$ والمغناطيسي $\vec{B}$ المعطين بالمعيار $\{\vec{A},\mathcal{V}\}$ ، وذلك بفرض أننا أهملنا السبين ، من الجدير بالذكر أيضا أن صيغة الهاملتوني (I.28) تتعلق فقط بالكمونين $\vec{A}$ و $\mathcal{V}$ وهذا يعني أن وصف الحركة يتعلق بالمعيار المختار،

وهكذا يجب أن تكون التوقعات ، المتعلقة بالسلوك الفيزيائي للجسيم، واحدة من أجل معيارين متكافئين وبالتالي فان صيغة الهاملتوني لاتتغير بالنسبة للمعيار .

من الجدير بالذكر أنه في حالة أخذ السبين بعين الاعتبار، يجب اضافة الى الهاملتوني (I.28)، الطاقة الكامنة الناتجة عن السبين وهي:

$$V_s = -\frac{q}{m}\ \vec{B}\cdot\vec{S} \qquad (I.29)$$

وبالتالي يصبح الهاملتوني (I.28) بالشكل:

$$H = \frac{1}{2m}\left[\vec{P} - q\vec{A}(\vec{r},t)\right]^2 + q\,\mathcal{V}(\vec{r},t) - \frac{q}{m}\ \vec{B}\cdot\vec{S} \qquad (I.30)$$

يدعى الهاملتوني (I.30) هاملتوني باولي .

2- مسألة محلولة (II) :

ادرس حركة الكترون موجود في حقل تحريض مغناطيسي منتظم ومتجانس .

الحـــل :

لندرس في البداية حركة الالكترون ، بدون أخذ السبين بعين الاعتبار ، في الميكانيك الكلاسيكي . في الحقيقة ان الالكترون يخضع لقوة لورنتر :

$$\vec{F} = q\left[\vec{v} \times \vec{B}(\vec{r})\right] \qquad (II.1)$$

حيث $\vec{v}$ سرعته . بمساواة هذه القوة مع قوة نيوتن نحصل على المعادلة :

$$m\frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F} \qquad (II.2)$$

بفرض ان حقل التحريض المغناطيسي موجه باتجاه المحور oz ، بحل معادلات الحركة (II.2) نحصل المركبات على المحاور :

$$x(t) = x_0 + r \cos(\omega_c t - \varphi_0) \qquad (II.3a)$$

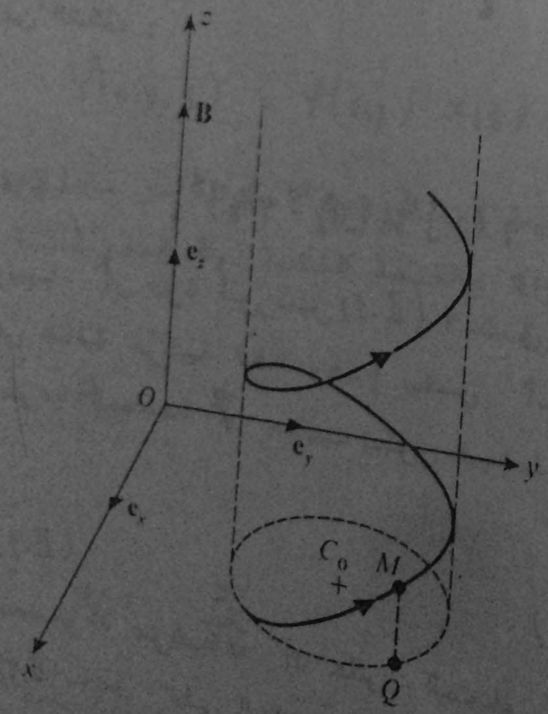
$$y(t) = y_0 + r \sin(\omega_c t - \varphi_0) \qquad (II.3b)$$

$$z(t) = z_0 + v_z t \qquad (II.3c)$$

حيث x_0 و y_0 و z_0 و r و φ_0 و v_z ثوابت تتعلق بالشروط البدائية و النبض السيكلوتروني .

$$\omega_c = -q \frac{B}{m} \qquad (II.4)$$

وتظهر المعادلات (II.3) ان مسقط حركة الالكترون على المستوى xoy يمثل حركة دائرية منتظمة ، سرعتها الزاوية ω_c ، وطورها البدائي φ_0 ، ونصف قطر الدائرة التي ترسمها الحركة r واحداثيات مركزها C_0 هي x_0 و y_0 . اما مسقطها على المحور oz فهو حركة مستقيمة منتظمة . وهكذا فان الالكترون يقوم بحركة على لولب محوره مواز للمحور oz ويمر من C_0 الشكل (7.4).



شكل (7.4)

المسار الكلاسيكي لالكترون موجود في حقل تحريض مغناطيسي متجانس ومنتظم مواز للمحور oz ، يتحرك الالكترون على مسار لولبي وبسرعة ثابتة ، على لولب محوره مواز للمحور oz ويمر من C_0.

أما من الناحية الكوانتية فنلاحظ ان حقل التحريض المغناطيسي $\vec{B}(\vec{r})$ يرتبط بالكمون الشعاعي $\vec{A}(\vec{r})$ حسب مايلي :

$$\vec{B}(\vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}) \qquad (II.5)$$

يمكن ان يأخذ الكمون الشعاعي $\vec{A}(\vec{r})$ ، في حالة كون حقل التحريض المغناطيسي المتجانس ، الشكل التالي :

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r} \qquad (II.6)$$

فتكون مركبات الكمون الشعاعي على المحاور الاحداثية :

$$A_x = -\frac{1}{2} B y \qquad (II.7a)$$

$$A_y = \frac{1}{2} B x \qquad (II.7b)$$

$$A_z = 0 \qquad (II.7c)$$

ويصبح الهاملتوني ، بالاعتماد على العلاقة (I.28) من المسألة (I) من الشكل :

$$H = \frac{1}{2m} [\vec{P} - q\vec{A}]^2 =$$
$$= \frac{1}{2m} \{ [P_x - qA_x]^2 + [P_y - qA_y]^2 + [P_z - qA_z]^2 \} \qquad (II.8)$$

وبما أن قوة لورنتز (II.1) لاتشتق من كمون ، فان الطاقة الكلية هي طاقة حركية فقط وهذا يعني أنه باستطاعتنا ادخال مفهوم السرعة المعممة $\vec{V}$ بحيث يكون الهاملتوني (II.8) من الشكل :

$$H = \frac{1}{2} m \vec{V}^2 =$$
$$= \frac{1}{2} m (V_x^2 + V_y^2 + V_z^2) \qquad (II.9)$$

وبمساواة مركبات H على المحاور الاحداثية في المعادلتين (II.8) و(II.9) نحصل على العلاقات التالية :

$$mV_x = P_x + \frac{qB}{2} y \quad (II.10_a)$$

$$mV_y = P_y - \frac{qB}{2} x \quad (II.10_b)$$

$$mV_z = P_z \quad (II.10_c)$$

وهكذا نستطيع كتابة الهاملتوني بشكل مجموع هاملتونين : أحدهما H_1 يتعلق بالمتحول z فقط والثاني H_2 يتعلق بالمتحولين (x, y) فقط :

$$H = H_2 + H_1 = \frac{1}{2m}\left(V_x^2 + V_y^2\right) + \frac{P_z^2}{2m} \quad (II.11)$$

وبما أن H_1 يتعلق فقط بـ z و H_2 يتعلق فقط بـ x و y فان علاقات التبادل التالية محققة :

$$[H, H_1] = [H, H_2] = [H_1, H_2] = 0 \quad (II.12)$$

وهذا يقتضي بأن التابع الموجي $\psi(x,y,z)$ الذي يصف الالكترون هو عبارة عن جداء تابعين أحدهما $\varphi(x,y)$ متعلق فقط بالمتحولين x ، y والثاني $\chi(z)$ متعلق فقط بالمتحول z :

$$\psi(x,y,z) = \varphi(x,y)\ \chi(z) \quad (II.13)$$

وتكون القيمة الخاصة E_{tot} المقابلة للتابع $\psi(x,y,z)$ مكونة من مجموع القيمة الخاصة E_1 المقابلة للتابع $\chi(z)$ والقيمة الخاصة E_2 المقابلة للتابع $\varphi(x,y)$ حيث :

$$E_{tot} = E_1 + E_2 \quad (II.14)$$

يصف الهاملتوني H_1 :

$$H_1 = \frac{P_z^2}{2m} \quad (II.15)$$

حركة جسيم حر يتحرك حسب المحور oz ، ونعلم أن توابعه الخاصة

هي عبارة عن امواج مستوية مقابلة للقيم الخاصة التالية :

$$\chi(z) = A e^{i k_z z} \quad (\text{II}.16a)$$

$$E_1(z) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{II}.16b)$$

ويذكرنا الهاملتوني :

$$H_2 = \frac{1}{2m}\left(V_x^2 + V_y^2 \right) \quad (\text{II}.17)$$

بالهاملتوني الذي يصف الهزاز التوافقي البسيط:

$$H_{osc} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2 \right) \quad (\text{II}.18)$$

بحيث تحقق $\hat{P}$ و $\hat{Q}$ علاقة التبادل التالية :

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = i \quad (\text{II}.19)$$

لنوجد تبادل V_x و V_y :

$$[V_x, V_y] = \left[\frac{1}{m}\left(P_x + \frac{qB}{2} y\right), \frac{1}{m}\left(P_y - \frac{qB}{2} x\right)\right] =$$

$$= \frac{1}{m^2}\left\{ [P_x, P_y] - \frac{qB}{2}[P_x, x] + \frac{qB}{2}[y, P_y] - \frac{q^2B^2}{4}[y, x]\right\} =$$

$$= \frac{1}{m^2}\left[-\frac{qB}{2}(-i\hbar) + \frac{qB}{2}(i\hbar)\right] = i\hbar \frac{qB}{m^2} \quad (\text{II}.20)$$

ليصف الهاملتوني (II.17) هزازاً توافقياً بسيطاً يكفي ان نفرض :

$$V'_x = \frac{m}{\sqrt{q\hbar B}} V_x \quad (\text{II}.21a)$$

$$V'_y = \frac{m}{\sqrt{q\hbar B}} V_y \quad (\text{II}.21b)$$

ليكون مبادلهمـــا :

$$[V'_x, V'_y] = i \quad (\text{II}.22)$$

وهكذا يكتب H_2 بالشكل :

$$H_2 = \frac{1}{2}\hbar \frac{qB}{m} \left(V_x^2 + V_y^2 \right) =$$

$$= \frac{\hbar \omega_c}{2} \left(V_x^2 + V_y^2 \right) \qquad (II.23)$$

وهو شكل الهاملتوني نفسه (II.18)، وبذلك تكون طاقته الخاصة :

$$E_2 = E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \quad : (n = 0, 1, 2, \dots) \qquad (II.24)$$

المقابلة للتوابع الخاصة :

$$\varphi_n = H_n(V_x) \, e^{-V_x^2/2} \qquad (II.25)$$

حيث $H_n(\xi)$ كثيرة حدود هرميت :

$$H_n(\xi) = \left(2\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n \times 1 \qquad (II.26)$$

وهكذا يكون الحل العام من الشكل :

$$\Psi(x,y,z) = \varphi_n(x,y) \; \chi(z) \qquad (II.27)$$

المقابل للقيم الخاصة :

$$E_{tot} = E_2(x,y) + E_1(z) =$$

$$= \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \quad : (n = 0, 1, 2, \dots) \qquad (II.28)$$

تسمى سويات الطاقة (II.28) سويات لاندوا (Niveaux de Landau)، ونلاحظ أن الطاقة المقابلة للحركة على المحور oz غير مكممة بينما هي مكممة بالنسبة الحركة في المستوى xoy .

الجسيمات المتطابقة - مبدأ باولي

٥٤ - الجسيمات المتطابقة - تعريف :

نقول عن جسيمين انهما متطابقين اذا كان لهما الخواص الذاتية نفسها (كتلة ،سبين ، شحنة، الخ ...). هكذا فان جميع الألكترونات الموجودة في الكون متطابقة، و بالمثل جميع البروتونات وجميع ذرات الهيدروجين أيضاً. ان هذا التعريف يقودنا الى النتيجة الهامة التالية : لايغير تبديل دَوْرَي جسيمين متطابقين مكوّنين لجملة فيزيائية من خواصها ولايوءثر في تطورها مع الزمن .

يجب ان نلاحظ أن هذا التعريف مستقل عن الشروط التجريبية التي ندرس فيها الجسيمات .

٥٥ - الجسيمات المتطابقة في الميكانيك الكلاسيكي:

لاتسبب دراسة الجملة الفيزيائية المكوّنة من جسيمات متطابقة أية صعوبات في الميكانيك الكلاسيكي ، وذلك ناتج عن ان كل جسيم من جسيمات الجملة ، يتحرك وفق مسار محدد تماماً ، الأمر الذي يسمح بتمييز الجسيمات بعضها عن بعض وبمتابعة حركتها اثناء تطور حالة الجملة مع الزمن .

لتوضيح هذه النقطة لندرس جملة مكوّنة من جسيمين متطابقين. في الحقيقة، في الميكانيك الكلاسيكي، تحدد حالة الجملة تماما في اللحظة البدائية t_0 بالمعطيات التي تحدد موضعي وسرعتي الجسيمين المكوّنين لها في هذه اللحظة، ولتكن $\{\vec{r}_0, \vec{v}_0\}$ و $\{\vec{r}'_0, \vec{v}'_0\}$. لنرمز بـ $\vec{r}_1(t)$ و $\vec{v}_1(t)$ لموضع وسرعة الجسيم (1) في اللحظة t وبـ $\vec{r}_2(t)$ و $\vec{v}_2(t)$ لموضع وسرعة الجسيم (2) في اللحظة نفسها. ان كون الجسيمين متطابقين يعطي أنه يمكن وصف الحالة الفيزيائية البدائية بشكلين مختلفين، في الحقيقة نستطيع اما أن نفرض أن :

$$\left.\begin{aligned} \vec{r}_1(t_0) &= \vec{r}_0 \quad , \quad \vec{r}_2(t_0) = \vec{r}'_0 \\ \vec{v}_1(t_0) &= \vec{v}_0 \quad , \quad \vec{v}_2(t_0) = \vec{v}'_0 \end{aligned}\right\} \tag{8.1}$$

أو بالعكس :

$$\left.\begin{aligned} \vec{r}_1(t_0) &= \vec{r}'_0 \quad , \quad \vec{r}_2(t_0) = \vec{r}_0 \\ \vec{v}_1(t_0) &= \vec{v}'_0 \quad , \quad \vec{v}_2(t_0) = \vec{v}_0 \end{aligned}\right\} \tag{8.2}$$

لندرس الآن تطور الجملة مع الزمن، ولنفرض أن حل جملة معادلات الحركة المعطاة بالشروط البدائية (8.1) هي :

$$\vec{r}_1(t) = \vec{r}(t) \quad , \quad \vec{r}_2(t) = \vec{r}'(t) \tag{8.3}$$

حيث $\vec{r}(t)$ و $\vec{r}'(t)$ توابع شعاعية. بما أن الجسيمين متطابقان فان تبديل دوريهما لايغير من خواص الجملة المكوّنة لهما ولايوءثر في تطورها مع الزمن وهذا يقود الى أن حل جملة معادلات الحركة المعطاة بالشروط البدائية (8.2) هي بالضرورة :

$$\vec{r}_1(t) = \vec{r}'(t) \quad , \quad \vec{r}_2(t) = \vec{r}(t) \tag{8.4}$$

حيث $\vec{r}(t)$ و $\vec{r}'(t)$ هي التوابع المعطاة نفسها في (8.3). نلاحظ أن الوصفين الرياضيين الممكنين للحالة الفيزيائية متكافئان تماماً لأنهما يقودان الى التوقع الفيزيائي نفسه التالي : ان الجسيم الذي انطلق من $\{\vec{r}_0, \vec{v}_0\}$ في اللحظة البدائية t_0 موجود في $\vec{r}(t)$ في اللحظة

t وبسرعة $\vec{v}(t) = d\vec{r}/dt$ وذلك الذي انطلق من $\{\vec{r}_0', \vec{v}_0'\}$ موجود في

$\vec{r}'(t)$ وسرعة $\vec{v}'(t) = d\vec{r}'/dt$. ضمن هذه الشروط ، يكفي أن نختار في

اللحظة البدائية احدى الصيغتين الرياضيتين الممكنتين ونهمل وجود

الأخرى بذلك نعالج الجملة كما لو أن الجسيمين المكوّنين لها

مختلفان وليسا متطابقين وكما لو أن الرقمين (1) و (2) اللذين

ألصقناهما بالجسيمين ، بشكل عشوائي ، في اللحظة t_0 ، صفتان

ذاتيتان تميزانهما : بما أننا نستطيع متابعة كل جسيم على

مساره المحدد تماما فاننا نستطيع وفي كل لحظة أن نعرف اين يقع

الجسيم (1) ، وأين يقع الجسيم (2) .

56 - الجسيمات المتطابقة في الميكانيك الكوانتي :

ان دراسة الجمل الفيزيائية المكوّنة من جسيمات متطابقة في

الميكانيك الكوانتي تختلف بشكل جذري عنها في الميكانيك الكلاسيكي

حيث أن المسار ليس له أي معنى حسب مبدأ عدم التعيين لهاينزبرغ.

ولتوضيح هذا الاختلاف نعود الى الجملة المكوّنة من جسيمين متطابقين ،

ولنفرض أننا استطعنا تعيين موضعي الجسيمين في اللحظه t_0 هذا يعني

أن التابعين الموجيين المرافقين لهما معينان تماما. لنتخيل الآن

تجربة يحدث فيها التصادم بين الجسيمين في جملة مركز كتلتهما ،

الشكل (8.1) . يتجه الجسيمان أحدهما نحو الآخر قبل حدوث التصادم ،

لنعط الرقم (1) للجسيم القادم من الجهة اليسارية والرقم (2) للجسيم

القادم من الجهة اليمينية ، الشكل (8.1a) ، من ثم تتداخل التوابع

الموجية عند التصادم ، الشكل (8.1b) ، أما بعد التصادم فان

للمنطقة من الفضاء ، التي تعطي قيما محسوسة لاحتمال وجود الجسيمين ،

شكل طوق كروي يزداد نصف قطره مع الزمن ، يظهر الشكل (8.1c) شكلاً

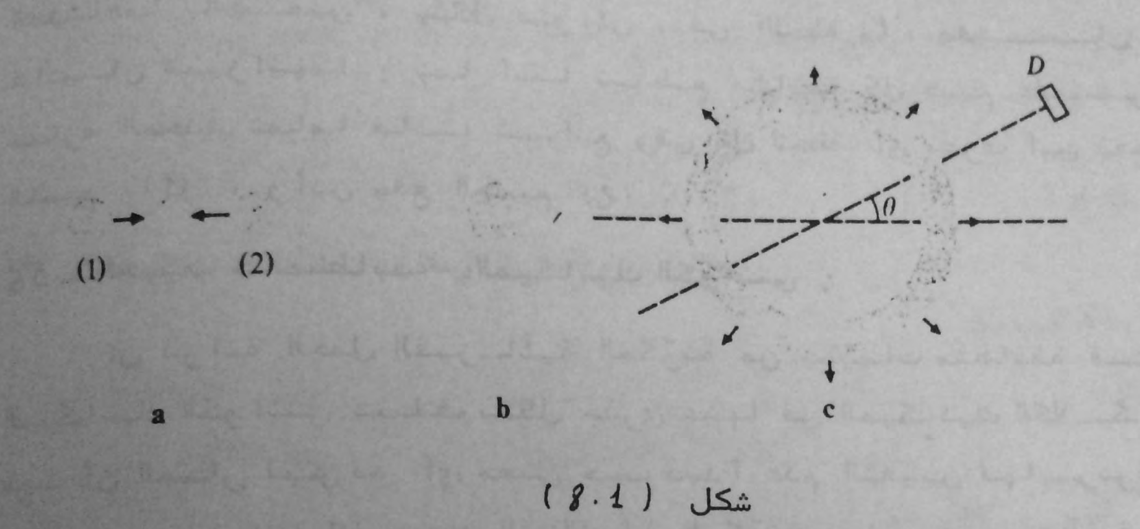
تخطيطيا لها. لنفرض أن عدادا D ، يصنع زاوية θ مع السرعة

البدائية للجسيم (1) ، استطاع التقاط أحد الجسيمين ، فان الجسيم

الآخر، وحسب مبدأ انحفاظ كمية الحركة، سيتحرك بالاتجاه المعاكس

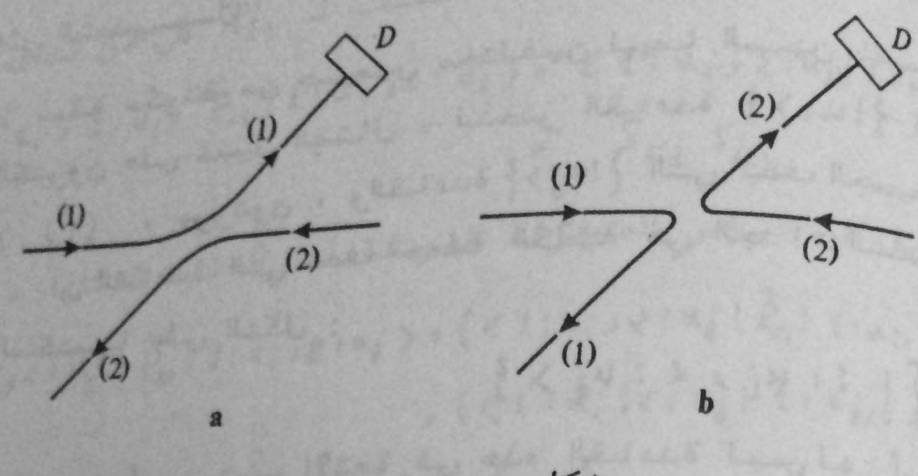
للاتجاه الموجود به العداد D . في الحقيقة من المستحيل علينا تحديد

أي من الجسيمين التقط العداد وذلك لوجود طريقين ممكنين يمكن للجملة أن تسلكهما اعتباراً من الحالة البدائية الى الحالة النهائية التي حصلنا عليها بعد القياس . والشكل (8.2) يوضح هذين الطريقين بشكل تخطيطي في a و b فيه ، هذا مايسمى بانطباق (تحلل التبديل .



شكل (8.1)

تمثيل تخطيطي للتابعين الموجيين اللذين يمثلان اصطدام جسيمين متطابقين . (a) يتجه التابعان الموجيان الواحد نحو الآخر قبل التصادم . (b) يتداخل التابعان الموجيان أثناء التصادم. (c) للمنطقة من الفضاء التي تعطي قيما محسوسة لاحتمال وجود الجسيمين شكل طوق كروي ، وبما أن الجسيمين متطابقان فانه من المستحيل علينا، عندما يلتقط العداد D جسيما، أن نعرف أي تابع موجي كان مرافقاً له قبل التصادم (1) أم (2).



شكل (8.2)

تمثيل تخطيطي للطريقتين التي يمكن للجملة أن تسلكهما اعتباراً من الحالة البدائية وحتى الحالة النهائية الموجودة بعد القياس . نظراً لكون الجسيمات متطابقة لاشيء يسمح لنا بتحديد أي الطريقين اتبعت .

من هنا تكمن الصعوبة في تطبيق مسلّمات الميكانيك الكوانتي ، حيث أنه لحساب احتمال حصولنا على نتائج أحد القياسات ينبغي معرفة الشعاع الذي يمثل الحالة البدائية للجملة والشعاع الذي يمثل حالتها النهائية . ان الحالة البدائية ، في تجربتنا ، معينة بشعاع وحيد أما من أجل الحالة النهائية فاننا نستطيع كتابة شعاعين يقابلان الطريقين الممثلين في الشكلين (8.2a) و (8.2b)، وهذان الشعاعان يقابلان الحالة النهائية للجملة . اذن من أجل حساب احتمال حصولنا على نتائج أحد القياسات هل نختار الشعاع الذي يمثل الطريق (8.2a) ؟ أو هل نختار الشعاع الذي يمثل الطريق (8.2b) ؟ يمكن أن نفكر بالأخذ بعين الاعتبار الشعاعين معا ولكن في هذه الحالة هل نأخذ مجموع طويلتي الاحتماليين ؟ أم نأخذ الفرق ؟ سنرى مستقبلا أن كل حالة من الحالات المذكورة سابقاً تعطينا نتيجة مختلفة عن الأخرى .

57 ـ موءثر التبديل :

نأخذ جملة مكونة من جسيمين مختلفين لهما السبين نفسه ، بروتون والكترون على سبيل المثال ، لنختر القاعدة $\{|u_i\rangle\}$ التي تصف الجسيم (1) ، بروتون ، والقاعدة $\{|u_j\rangle\}$ التي تصف الجسيم (2)، الالكترون ، ان القاعدة التي تصف الجملة الكلية هي الجداء التنسوري للقاعدتين ولنكتبها على الشكل :

$$\{|1:u_i , 2:u_j\rangle\} \qquad (8.5)$$

يجب أن نلاحظ هنا أن ترتيب الأشعة في هذه القاعدة ليس له أية اهمية هذا يعني أن :

$$|1:u_i , 2:u_j\rangle \equiv |2:u_j , 1:u_i\rangle \qquad (8.6)$$

ولكن يجب أن ننتبه الى أنه في الحالة التي يكون فيها $i \neq j$ فان :

$$|1:u_i , 2:u_j\rangle \neq |2:u_i , 1:u_j\rangle \qquad (8.7)$$

نعرّف الموءثر الخطي $\hat{P}_{21}$ ونسميه موءثر التبديل بالشكل :

$$\hat{P}_{21}|1:u_i , 2:u_j\rangle = |2:u_i , 1:u_j\rangle = |1:u_j , 2:u_i\rangle \quad (8.8)$$

58 ـ خواص موءثر التبديل :

نلاحظ أنه اذا طبقنا الموءثر $\hat{P}_{21}$ مرة ثانية فاننا سنعيد الشعاع الى حالته البدائية :

$$(\hat{P}_{21})^2|1:u_i , 2:u_j\rangle = \hat{P}_{21}|2:u_i , 1:u_j\rangle = |1:u_i , 2:u_j\rangle \quad (8.9)$$

هذا يعني أن :

$$(\hat{P}_{21})^2 = 1 \qquad (8.10)$$

ان موءثر التبديل هرميتي وهذا يعني أن :

$$\hat{P}^{\dagger}_{21} = \hat{P}_{21} \qquad (8.11)$$

للبرهان على صحة ذلك يكفي أن نبرهن أن كل عنصر من عناصر المصفوفة التي تمثل $\hat{P}_{21}$ يساوي العنصر المقابل له في المصفوفة الممثلة لـ $\hat{P}^{\dagger}_{21}$

في الحقيقة أن عناصر المصفوفة الممثلة لـ $\hat{P}_{21}$ هي من الشكل :

$$\langle 1:u_{i'}, 2:u_{j'}|\hat{P}_{21}|1:u_i, 2:u_j\rangle = \langle 1:u_{i'}, 2:u_{j'}|1:u_j, 2:u_i\rangle = \delta_{i'j}\,\delta_{j'i} \quad (8.12)$$

وبالمقابل ان عناصر المصفوفة الممثلة لـ $\hat{P}^{+}_{21}$ لها الشكل :

$$\langle 1:u_{i'}, 2:u_{j'}|\hat{P}^{+}_{21}|1:u_i, 2:u_j\rangle = (\langle 1:u_i, 2:u_j|\hat{P}_{21}|1:u_{i'}, 2:u_{j'}\rangle)^{*}$$
$$= (\langle 1:u_i, 2:u_j|1:u_{j'}, 2:u_{i'}\rangle)^{*}$$
$$= \delta_{i'j}\,\delta_{j'i} \quad (8.13)$$

بالمقارنة بين العلاقتين (8.12) و (8.13) نجد أن كل عنصر من عناصر المصفوفة التي تمثل المؤثر $\hat{P}_{21}$ يساوي العنصر المقابل له في المصفوفة الممثلة للمؤثر $\hat{P}^{+}_{21}$ ، الأمر الذي يبرهن صحة العلاقة (8.11).

ينتج مباشرة من العلاقتين (8.10) و (8.11) أن :

$$\hat{P}^{+}_{21}\,\hat{P}_{21} = \hat{P}_{21}\,\hat{P}^{+}_{21} = 1 \quad (8.14)$$

9§-الأشعة المتناظرة والأشعة اللامتناظرة :

ان المؤثر $\hat{P}_{21}$ هرميتي حسب العلاقة (8.11) وبالتالي فان قيمه الخاصة حقيقية . نلاحظ أن مربع هذه القيم يساوي الواحد حسب العلاقة (8.9) هذا يعني أن القيم الخاصة لـ $\hat{P}_{21}$ هي بكل بساطة ± 1 . نسمي الشعاع الخاص لـ $\hat{P}_{21}$ المقابل للقيمة الخاصة $+1$ شعاعاً متناظراً والشعاع الخاص مقابل للقيمة الخاصة -1 شعاعاً لامتناظراً اذ يكون لدينا :

$$\hat{P}_{21}|\Psi_S\rangle = |\Psi_S\rangle \quad : |\Psi_S\rangle \text{ شعاع متناظر}$$
$$\hat{P}_{21}|\Psi_A\rangle = -|\Psi_A\rangle \quad : |\Psi_A\rangle \text{ شعاع لامتناظر} \quad (8.15)$$

نعرّف المؤثرين $\hat{S}$ و $\hat{A}$ بالشكل :

$$\hat{S} = \frac{1}{2}(1 + \hat{P}_{21}) \quad (8.16a)$$
$$\hat{A} = \frac{1}{2}(1 - \hat{P}_{21}) \quad (8.16b)$$

ان الموءثرين $\hat{S}$ و $\hat{A}$ هما موءثرا اسقاط وهذا واضح من العلاقة (8.10) حيث نجد :

$$\hat{S}^2 = \hat{S} \quad (8.17a)$$

$$\hat{A}^2 = \hat{A} \quad (8.17b)$$

وهما أيضاً موءثرا اسقاط في فراغين جزئيين متعامدين ، من العلاقة (8.10) نفسها نجد :

$$\hat{A}\hat{S} = \hat{S}\hat{A} = 0 \quad (8.18)$$

بالاضافة الى ذلك فان هذين الفراغين الجزئيين متتامان وهذا ينتج من التعريف (8.16) :

$$\hat{S} + \hat{A} = 1 \quad (8.19)$$

أما العلاقة (8.11) فانها توضح لنا أنهما هرميتيان :

$$\hat{S}^+ = \hat{S} \quad (8.20a)$$

$$\hat{A}^+ = \hat{A} \quad (8.20b)$$

واذا كان الشعاع $|\psi\rangle$ شعاعا كيفيا من فراغ حالات الجملة المدروسة فان الشعاع $\hat{S}|\psi\rangle$ شعاع متناظر والشعاع $\hat{A}|\psi\rangle$ شعاع لامتناظر. في الحقيقة ان هذه النتيجة تنتج مباشرة من العلاقة (8.10)

$$\hat{P}_{21}\,\hat{S}|\psi\rangle = \hat{S}|\psi\rangle \quad (8.21a)$$

$$\hat{P}_{21}\,\hat{A}|\psi\rangle = -\hat{A}|\psi\rangle \quad (8.21b)$$

لهذا السبب نسمي الموءثر $\hat{S}$ موءثر التناظر و $\hat{A}$ موءثر اللا تناظر.

60 ـ تحولات الملحوظات الفيزيائية بواسطة التبديل :

نفرض أن أشعة القاعدة $\{|u_i\rangle\}$ ، التي تصف الجسيم (1) ، هي أشعة خاصة للملحوظ الفيزيائي $\hat{B}(1)$ مقابل للقيم الخاصة b_i ، وان أشعة القاعدة $\{|u_j\rangle\}$ ، التي تصف الجسيم (2) ، هي أشعة خاصة للموءثر $\hat{B}(2)$ مقابلة للقيم الخاصة b_j ولنوجد تأثير الموءثر $\hat{P}_{21}\,\hat{B}(1)\,\hat{P}_{21}^+$ على

شعاع كيفي من القاعدة المعطاة بالعلاقة (8.5) :

$$\hat{P}_{21}\,\hat{B}(1)\,\hat{P}_{21}^{+}\,|1:u_i\,,2:u_j\rangle = \hat{P}_{21}\,\hat{B}(1)\,|1:u_j\,,2:u_i\rangle =$$

$$= b_j\,\hat{P}_{21}\,|1:u_j\,,2:u_i\rangle =$$

$$= b_j\,|1:u_i\,,2:u_j\rangle \qquad (8.22)$$

بتطبيق المؤثر $\hat{B}(2)$ مباشرة على الشعاع نفسه فاننا نحصل على النتيجة نفسها هذا يعطي أن :

$$\hat{P}_{21}\,\hat{B}(1)\,\hat{P}_{21}^{+} = \hat{B}(2) \qquad (8.23)$$

بالطريقة نفسها نجد أن :

$$\hat{P}_{21}\,\hat{B}(2)\,\hat{P}_{21}^{+} = \hat{B}(1) \qquad (8.24)$$

أما من أجل الملحوظات التي يدخل في تركيبها الدليلان (1) و(2) كما في $\hat{B}(1)+\hat{C}(2)$ أو $\hat{B}(1)\hat{C}(2)$ فاننا نحصل على نفس النتيجة حيث من أجل الملحوظ الفيزيائي $\hat{B}(1)+\hat{C}(2)$:

$$\hat{P}_{21}\,[\hat{B}(1)+\hat{C}(2)]\,\hat{P}_{21}^{+} = \hat{P}_{21}\,\hat{B}(1)\,\hat{P}_{21}^{+} + \hat{P}_{21}\,\hat{C}(2)\,\hat{P}_{21}^{+} = \hat{B}(2)+\hat{C}(1) \qquad (8.25)$$

وبالمثل من أجل الملحوظ الفيزيائي $\hat{B}(1)\,\hat{C}(2)$ وبالاعتماد على العلاقة (8.14) نجد :

$$\hat{P}_{21}\,\hat{B}(1)\,\hat{C}(2)\,\hat{P}_{21}^{+} = \hat{P}_{21}\,\hat{B}(1)\,\hat{P}_{21}^{+}\,\hat{P}_{21}\,\hat{C}(2)\,\hat{P}_{21}^{+} = \hat{B}(2)\,\hat{C}(1) \qquad (8.26)$$

يمكن تعميم هذه النتائج على جميع الملحوظات الفيزيائية التي يمكن التعبير عنها كتوابع لملحوظات فيزيائية من الشكل $\hat{B}(1)$ و $\hat{C}(2)$ والتي نرمز لها بالشكل $\hat{\theta}(1,2)$ حيث نجد :

$$\hat{P}_{21}\,\hat{\theta}(1,2)\,\hat{P}_{21}^{+} = \hat{\theta}(2,1) \qquad (8.27)$$

حيث $\hat{\theta}(2,1)$ عبارة عن ملحوظ فيزيائي حصلنا عليه بعد تبديل موضعي الدليلين (1) و (2) أينما وجدا .

نقول أن الملحوظ الفيزيائي $\hat{\theta}_s(1,2)$ انه تناظري اذا تحقق لدينا

$$\hat{\Theta}_s(1,2) = \hat{\Theta}_s(2,1) \tag{8.28}$$

بالرجوع الى العلاقة (8.27) نجد أن الملحوظات الفيزيائية التناظرية تحقق العلاقة التالية :

$$\hat{P}_{21}\,\hat{\Theta}_s(1,2) = \hat{\Theta}_s(2,1)\,\hat{P}_{21} \tag{8.29}$$

هذا يعني أن جميع الملحوظات الفيزيائية التناظرية تقبل التبادل مع موءثر التبديل .

61 ـ جمل تحتوي على N جسيم $(N>2)$:

تختلف خواص موءثرات التبديل في جملة مكوّنة من N جسيماً لها نفس السبين (حيث $N>2$) عن خواص الموءثر $\hat{P}_{21}$ ، ولاعطاء فكرة عن هذا الاختلاف ندرس الحالة $N=3$.

نفرض أنه لدينا جملة مكوّنة من ثلاثة جسيمات مختلفة ولها نفس السبين ، تعطى أشعة القاعدة التي تصف هذه الجملة ، كما في الفقرة (57) ، بالشكل :

$$\{\,|1:u_i\,,\,2:u_j\,,\,3:u_k\rangle\,\} \tag{8.30}$$

نعرّف على هذه القاعدة الموءثر الخطي $\hat{P}_{npq}$ ، حيث أن المجموعة (n,p,q) هي عبارة عن تبديل كيفي للأرقام $(1,2,3)$ على الترتيب ، بالشكل:

$$\hat{P}_{npq}\,|1:u_i\,,\,2:u_j\,,\,3:u_k\rangle = |n:u_i\,,\,p:u_j\,,\,q:u_k\rangle \tag{8.31}$$

نسمي الموءثر الخطي $\hat{P}_{npq}$ موءثر التبديل ولنوضح عمله على المثال التالي:

$$\hat{P}_{231}\,|1:u_i\,,\,2:u_j\,,\,3:u_k\rangle = |2:u_i\,,\,3:u_j\,,\,1:u_k\rangle =$$

$$= |1:u_k\,,\,2:u_i\,,\,3:u_j\rangle \tag{8.32}$$

نلاحظ أنه لدينا $3!=6$ موءثرات تبديل من الشكل $\hat{P}_{npq}$ في القاعدة (8.30) وهي :

$$\hat{P}_{123},\ \hat{P}_{312},\ \hat{P}_{231},\ \hat{P}_{132},\ \hat{P}_{321},\ \hat{P}_{213} \qquad (8.33)$$

وأن المؤثر $\hat{P}_{123}$ هو مؤثر الواحدة لأن تأثيره على أي شعاع من القاعدة (8.30) يبقي الشعاع على حالـه :

$$\hat{P}_{123}|1:u_i, 2:u_j, 3:u_k\rangle = |1:u_i, 2:u_j, 3:u_k\rangle \qquad (8.34)$$

وهكذا وبالطريقة نفسها يمكن أن نعرّف $N!$ مؤثر تبديل في جملة مكونة من N جسيما لهم السبين نفسه بحيث يكون أحد هذه المؤثرات هو مؤثر الواحدة.

ان مجموعة مؤثرات التبديل تشكل زمرة، يمكن البرهان على ذلك على مجموعة المؤثرات (8.33) :

1 ـ ان هذه المجموعة تحتوي على عنصر الواحدة وهو هنا $\hat{P}_{123}$ حسب العلاقة (8.34).

2 ـ ناتج جداء مؤثري تبديل هو أيضا مؤثر تبديل ونبين على سبيل المثال أن :

$$\hat{P}_{312}\,\hat{P}_{132} = \hat{P}_{321} \qquad (8.35)$$

من أجل ذلك نؤثر بالطرف الأول من العلاقة (8.35) على شعاع كيفي من أشعة القاعدة (8.30):

$$\begin{aligned}\hat{P}_{312}\,\hat{P}_{132}|1:u_i, 2:u_j, 3:u_k\rangle &= \hat{P}_{312}|1:u_i, 3:u_j, 2:u_k\rangle = \\ &= \hat{P}_{312}|1:u_i, 2:u_k, 3:u_j\rangle = \\ &= |3:u_i, 1:u_k, 2:u_j\rangle = \\ &= |1:u_k, 2:u_j, 3:u_i\rangle \end{aligned} \qquad (8.36)$$

ونجد أن تأثير $\hat{P}_{321}$ يعطي نفس النتيجة :

$$\begin{aligned}\hat{P}_{321}|1:u_i, 2:u_j, 3:u_k\rangle &= |3:u_i, 2:u_j, 1:u_k\rangle = \\ &= |1:u_k, 2:u_j, 3:u_j\rangle \end{aligned} \qquad (8.37)$$

3 ـ لكل موءثر تبديل عنصر نظير هو بدوره موءثر تبديل ، فاذا اتبعنا الخطوات نفسها كما في 2 يمكن أن نبرهن :

$$\left.\begin{array}{l}\hat{P}_{123}^{-1} = \hat{P}_{123} \; , \quad \hat{P}_{312}^{-1} = \hat{P}_{231} \; , \quad \hat{P}_{231}^{-1} = \hat{P}_{312} \; , \\ \hat{P}_{132}^{-1} = \hat{P}_{132} \; , \quad \hat{P}_{213}^{-1} = \hat{P}_{213} \; , \quad \hat{P}_{321}^{-1} = \hat{P}_{321} \; ,\end{array}\right\} \quad (8.38)$$

بذلك نكون قد برهنا على أن المجموعة (8.33) تشكل زمرة ولكن يجب ملاحظة أن هذه الموءثرات لاتقبل التبادل فيما بينها. ولنبين على سبيل المثال أن :

$$[\hat{P}_{312}, \hat{P}_{132}] = \hat{P}_{312}\hat{P}_{132} - \hat{P}_{132}\hat{P}_{312} \neq 0 \qquad (8.39)$$

كنا قد برهنا سابقاً أن $\hat{P}_{312}\hat{P}_{132} = \hat{P}_{321}$ وباتباع الطريقة نفسها نجد أن:

$$\hat{P}_{132}\hat{P}_{312} = \hat{P}_{213} \neq \hat{P}_{321} = \hat{P}_{312}\hat{P}_{132} \qquad (8.40)$$

نعرّف موءثر النقل بأنه موءثر تبديل يغير دوري جسيمين فقط دون أن يوءثر على الجسيمات الأخرى* . ان الموءثرات $\hat{P}_{132}, \hat{P}_{321}, \hat{P}_{213}$ هي مثلا موءثرات نقل .

في الحقيقة يمكننا البرهان على أن كل موءثرات النقل هي موءثرات هرمية وأنها موءثرات واحدية وأن كل موءثر نقل يتطابق مع نظيره وذلك باتباع الطريقة نفسها التي برهنا فيها على صحة العلاقات (8.10) و (8.11) و (8.14). لموءثرات النقل أهمية كبرى حيث أنه يمكننا تحليل كل موءثر تبديل الى جداء مجموعة من موءثرات النقل . يمكننا كتابة موءثر التبديل الثاني من المجموعة (8.33) على الشكل :

$$\hat{P}_{312} = \hat{P}_{132}\hat{P}_{213} = \hat{P}_{321}\hat{P}_{132} = \hat{P}_{213}\hat{P}_{321} = \hat{P}_{132}\hat{P}_{213}(\hat{P}_{132})^2 = \dots \qquad (8.41)$$

*) يتطابق موءثر التبديل مع موءثر النقل في حالة كون N=2 .

ان تحليل موءثر تبديل ما الى جداء مجموعة من موءثرات النقل ليس وحيداً، ولكن يمكننا البرهان على أن ازدواجية عدد موءثرات النقل التي يتحلل اليها موءثر تبديل معين هي دوماً نفسها : نسمي هذه الازدواجية بازدواجية موءثر التبديل . هكذا نجد أن مجموعة الموءثرات $\hat{P}_{123}, \hat{P}_{312}, \hat{P}_{231}$ هي موءثرات زوجية ومجموعة الموءثرات $\hat{P}_{132}, \hat{P}_{321}, \hat{P}_{213}$ موءثرات فردية .

بما أنه يمكننا تحليل كل موءثر تبديل الى جداء مجموعة من موءثرات النقل وبما أن كل موءثر نقل هو موءثر واحدي اذن كل موءثر تبديل هو موءثر واحدي ولكنه ليس بالضرورة هرميتياً لأن موءثرات النقل لاتقبل التبادل بعضها عن بعض في الحالة العامة .

وأخيراً نلاحظ أن لمرافق موءثر التبديل نفس ازدواجية موءثر التبديل الذي هو مرافقه حيث أنه يساوي جداء نفس موءثرات النقل مرتبة بشكل عكسي .

62 - الأشعة المتناظرة ، والأشعة اللامتناظرة لجملة N جسيم :

وجدنا سابقا أن موءثرات التبديل لا تقبل التبادل فيما بينها في حالة كون $N>2$ هذا يعني لايمكننا ايجاد مجموعة متكاملة من الأشعة الخاصة المشتركة لهذه الموءثرات . غير أنه سنجد أن هناك مجموعة معينة من الأشعة التي يمكن أن تكون أشعة خاصة مشتركة لهذه الموءثرات .

ليكن $\hat{P}_\alpha$ موءثر تبديل ما في جملة مكونة من N جسيماً لها نفس السبين. نسمي الشعاع $|\psi_s\rangle$، الشعاع الكيفي من فراغ حالات الجملة، شعاعاً متناظراً اذا تحقق لدينا :

$$\hat{P}_\alpha |\psi_s\rangle = |\psi_s\rangle \tag{8.42}$$

ونسمي الشعاع $|\psi_A\rangle$ الشعاع الكيفي من فراغ حالات الجملة، شعاعاً لامتناظراً اذا تحقق :

$$\hat{P}_\alpha |\psi_A\rangle = \varepsilon_\alpha |\psi_A\rangle \tag{8.43}$$

حيث :

$$\varepsilon_\alpha = +1 \quad \text{... اذا كان } \hat{P}_\alpha \text{ موءثر تبديل زوجي} \tag{8.44}$$
$$\varepsilon_\alpha = -1 \quad \text{... اذا كان } \hat{P}_\alpha \text{ موءثر تبديل فردي}$$

تشكل مجموعة الأشعة المتناظرة ومجموعة الأشعة اللامتناظرة فراغين جزئيين $\mathcal{E}_A$ ، $\mathcal{E}_s$ من فراغ حالات الجملة $\mathcal{E}$.

نعرف الموءثرين :

$$\hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_\alpha \hat{P}_\alpha \tag{8.45}$$

$$\hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_\alpha \varepsilon_\alpha \hat{P}_\alpha \tag{8.46}$$

حيث أن الجمع يتم على $N!$ تبديلاً ممكناً لِ N وحيث ε_α معرفة في (8.44) . سنبين أن $\hat{S}$ و $\hat{A}$ موءثري اسقاط في الفراغات الجزئية $\mathcal{E}_s$ و $\mathcal{E}_A$ على الترتيب . نسمي الموءثر $\hat{S}$ موءثر التناظر و $\hat{A}$ موءثر اللاتناظر .

ان الموءثرين $\hat{S}$ و $\hat{A}$ هما موءثران هرميتيان أي أن :

$$\hat{S}^+ = \hat{S} \tag{8.47}$$

$$\hat{A}^+ = \hat{A} \tag{8.48}$$

وهذا واضح من التعريف ومن الفقرة (٥ ج) . ومن جهة أخرى نفرض أن $\hat{P}_{\alpha_0}$ موءثر تبديل كيفي فانه لدينا :

$$\hat{P}_{\alpha_0} \hat{S} = \hat{S} \hat{P}_{\alpha_0} = \hat{S} \tag{8.49}$$

$$\hat{P}_{\alpha_0} \hat{A} = \hat{A} \hat{P}_{\alpha_0} = \varepsilon_{\alpha_0} \hat{A} \tag{8.50}$$

ان هذه العلاقات تنتج من أن الموءثر $\hat{P}_{\alpha_0} \hat{P}_\alpha$ هو أيضاً موءثر تبديل حيث :

$$\hat{P}_{\alpha_0} \hat{P}_\alpha = \hat{P}_\beta \tag{8.51}$$

وذلك بفرض أن :

$$\varepsilon_\beta = \varepsilon_{\alpha_0} \varepsilon_\alpha \tag{8.52}$$

في الحقيقة اذا ثبتنا $\hat{P}_{\alpha 0}$ وجعلنا $\hat{P}_{\alpha}$ يأخذ شكل متتال جميع التبديلات الممكنة فان $\hat{P}_{\beta}$ يعطي أيضاً جميع التبديلات الممكنة، ولكن بترتيب مختلف ، بالنتيجة :

$$\hat{P}_{\alpha 0}\, \hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \hat{P}_{\alpha 0}\, \hat{P}_{\alpha} = \frac{1}{N!} \sum_{\beta} \hat{P}_{\beta} = \hat{S} \qquad (8.53)$$

$$\hat{P}_{\alpha 0}\, \hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha}\, \hat{P}_{\alpha 0}\, \hat{P}_{\alpha} = \frac{1}{N!}\, \varepsilon_{\alpha 0} \sum_{\beta} \hat{P}_{\beta} = \varepsilon_{\alpha 0}\, \hat{A} \qquad (8.54)$$

وبالطريقة نفسها نبرهن على المساواة عند ضرب $\hat{S}$ و $\hat{A}$ من اليمين لـ $\hat{P}_{\alpha 0}$. ومن جهة أخرى نلاحظ أن المعادلات (8.49) و(8.50) تعطي مباشرة أن :

$$\hat{S}^2 = \hat{S} \qquad (8.55)$$

$$\hat{A}^2 = \hat{A} \qquad (8.56)$$

في الحقيقة يمكننا أن نكتب :

$$\hat{S}^2 = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \hat{P}_{\alpha}\, \hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \hat{S} = \hat{S} \qquad (8.57)$$

$$\hat{A}^2 = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha}\, \hat{P}_{\alpha}\, \hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha}^2\, \hat{A} = \hat{A} \qquad (8.58)$$

لأن كل مجموع يحتوي على $N!$ حد .

ومن جهة أخرى فان :

$$\hat{A}\, \hat{S} = \hat{S}\, \hat{A} = 0 \qquad (8.59)$$

لأن :

$$\hat{A}\, \hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha}\, \hat{P}_{\alpha}\, \hat{S} = \frac{1}{N!}\, \hat{S} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} = 0 \qquad (8.60)$$

لأن نصف الأعداد ε_{α} مساوٍ لـ 1+ ونصفها الآخر مساوٍ الى 1- .

بذلك نكون قد برهنا على أن $\hat{S}$ و $\hat{A}$ هما عبارة عن موءثري اسقاط في $\mathcal{E}_S$ و $\mathcal{E}_A$ على الترتيب،ولهذا فان تأثيرهما على شعاع كيفي $|\psi>$ من فراغ حالات الجملة يعطي اما شعاعاً متناظراً أو شعاعاً لامتناظراً .

في الحقيقة من العلاقات (8.49) و (8.50) نجد أن :

$$\hat{P}_{\alpha_0}\, \hat{S}\, |\psi> = \hat{S}\, |\psi> \tag{8.61}$$

$$\hat{P}_{\alpha_0}\, \hat{A}\, |\psi> = \varepsilon_{\alpha_0}\, \hat{A}\, |\psi> \tag{8.62}$$

يجب أن نلاحظ هنا أنه من أجل $N>2$ أن موءثر التناظروموءثر اللاتناظر ليسا موءثري اسقاط في فراغين جزئيين متتامين ،على سبيل المثال من أجل $N=3$ ومن العلاقتين (8.45) و (8.46) نجد أن:

$$\hat{S} = \frac{1}{6}\left(\hat{P}_{123} + \hat{P}_{312} + \hat{P}_{231} + \hat{P}_{132} + \hat{P}_{321} + \hat{P}_{213}\right) \tag{8.63}$$

$$\hat{A} = \frac{1}{6}\left(\hat{P}_{123} + \hat{P}_{312} + \hat{P}_{231} - \hat{P}_{132} - \hat{P}_{321} - \hat{P}_{213}\right) \tag{8.64}$$

بجمع العلاقتين السابقتين نجد أن :

$$\hat{S} + \hat{A} = \frac{1}{3}\left(\hat{P}_{123} + \hat{P}_{312} + \hat{P}_{231}\right) \neq 1 \tag{8.65}$$

وهذا يعني أن فراغ حالات الجملة $\mathcal{E}$ ليس مجموعاً مباشراً للفراغين الجزئين منه :

الفراغ المتناظر $\mathcal{E}_S$ والفراغ اللامتناظر $\mathcal{E}_A$.

نفرض أن الملحوظ الفيزيائي $\hat{\Theta}_S(1,2,\ldots,N)$ متناظر تماماً بالنسبة لتبديل الأدلة $1,2,\ldots,N$ فانه يقبل التبادل مع أي موءثر تبديل :

$$\left[\hat{\Theta}_S(1,2,3,\ldots,N),\, \hat{P}_\alpha\right] = 0 \tag{8.66}$$

63 - مسلمة التناظر :

نسلّم أن مجموعة معينة فقط من أشعة فراغ حالات جملة مكوّنة من مجموعة من الجسيمات المتطابقة يمكن أن تصف الحالات الفيزيائية للجملة، وهذه الأشعة الفيزيائية اما أن تكون متناظرة أو لامتناظرة وذلك حسب طبيعة الجسيمات المتطابقة. نسمي الجسيمات الموصوفة بأشعة فيزيائية متناظرة : بوزونات ، وتلك الموصوفة بأشعة فيزيائية لامتناظرة : فيرميونات .

تنص اذن مسلّمة التناظر على قصر فراغ حالات جملة مكوّنة من مجموعة من الجسيمات المتطابقة على أحد الفراغات الجزئية $\mathcal{E}_S$ أو $\mathcal{E}_A$ حسب طبيعة الجسيمات المكوّنة للجملة، وليس على الفراغ الكلّي المكوّن من الجداء التنسوري لفراغات الحالات الفردية .

تنقسم الجسيمات الموجودة، في الطبيعة، طبقاً لهذه المسلّمة، الى نوعين : فيرميونات وبوزونات ، وتحقق كل الجسيمات المعروفة حالياً القاعدة التجريبية التالية : ان جميع الجسيميات ذات السبين المساوي لنصف عدد صحيح هي فيرميونات (مثل الالكترونات، البروتونات، ...) وكل الجسيميات ذات السبين المساوي لعدد صحيح هي بوزونات (مثل الفوتونات، الميزونات، ...).

في الحقيقة اذا كانت هذه القاعدة محققة من أجل جسيميات الأولية فانها أيضا محققة من أجل الجسيميات المكوّنة من الجسيميات الأولية . لنأخذ جملة مكوّنة من جسيميات مركبة من جسيميات أولية فان تبديل جسيمين مركبين يعود الى تبديل مكوّنات الجسيم الأول مع نظائرها من مكوّنات الجسيم الثاني . ان هذا التبديل لايغير الشعاع الفيزيائي الذي يصف حالة الجملة اذا كانت الجسيميات الأولية المكوّنة للجسيمين المبدلين بوزونات أو اذا كانت فيرميونات عددها زوجي ويتغير هذا الشعاع في حالة كون الجسيميات الأولية المكوّنة للجسيمين المبدلين فيرميونات عددها فردي .

64 – ازالة انطباق التبديل :

لنفحص في البداية كيف يمكن أن تزيل المسلّمة الجديدة التي أدخلناها في الفقرة السابقة انطباق التبديل الذي ذكرناها في الفقرة (56)، حيث يمكننا أن نوجز النقاش الذي أجريناه بما يلي :
بفرض أن $|u\rangle$ شعاع رياضي يمكن أن يصف الحالة الفيزيائية لجملة مكوّنة من N جسيماً متطابقاً، ان $\hat{P}_\alpha|u\rangle$ هو شعاع يمكن أن يصف الحالة الفيزيائية حيث $\hat{P}_\alpha$ موءثر تبديل كيفي . وكذلك جميع أشعة الفراغ الجزئي $\mathcal{E}_u$ المولّد من الشعاع $|u\rangle$ أو جميع تحويلاته بواسطة التبديل $\hat{P}_\alpha|u\rangle$ تصف هذه الحالة الفيزيائية . ان بعد الفراغ الجزئي $\mathcal{E}_u$ يمكن أن يأخذ جميع القيم من 1 الى $N!$ حسب الشعاع $|u\rangle$. فاذا كان بعد الفراغ الجزئي $\mathcal{E}_u$ أكبر من الواحد فان هناك مجموعة من الأشعة الرياضية التي تصف الحالة الفيزيائية نفسها. لدينا اذن انطباق التبديل.

في الحقيقة أن المسلّمة الجديدة التي أدخلناها تحدد الأشعة الرياضية التي يمكن أن تصف الحالة الفيزيائية : فهي يجب أن تنتمي اما الى $\mathcal{E}_S$ من أجل البوزونات أو الى $\mathcal{E}_A$ من أجل الفيرميونات . وهكذا نستطيع أن نزيل انطباق التبديل اذا استطعنا أن نبرهن على أن $\mathcal{E}_u$ يحتوي اما على شعاع واحد من $\mathcal{E}_S$ أو على شعاع واحد من $\mathcal{E}_A$ من أجل ذلك سنستعمل العلاقتين (8.49) و (8.50) المبرهنتين سابقا حيث :

$$\hat{S}|u\rangle = \hat{S}\,\hat{P}_\alpha|u\rangle \tag{8.67}$$

$$\hat{A}|u\rangle = \varepsilon_\alpha\,\hat{A}\,\hat{P}_\alpha|u\rangle \tag{8.68}$$

ان العلاقتين السابقتين تعطيان مسقط أشعة $\mathcal{E}_u$ على $\mathcal{E}_S$ أو على $\mathcal{E}_A$، وهكذا تحدد المسلّمة الشعاع الذي يمثل الحالة الفيزيائية : فهو الشعاع $\hat{S}|u\rangle$ من أجل البوزونات والشعاع $\hat{A}|u\rangle$ من أجل الفيرميونات . نسمي الأشعة $\hat{S}|u\rangle$ و $\hat{A}|u\rangle$ بالأشعة الفيزيائية .

65 – قاعدة تشكيل الأشعة الفيزيائية :

اعتماداً على المناقشة التي أجريناها في الفقرة السابقة

نستطيع الوصول الى القاعدة التي يجب تطبيقها لايجاد الشعاع الفيزيائي الذي يصف حالة فيزيائية معينة لجملة مكوّنة من N جسيماً متطابقاً وهي :

1 - نرقم الجسيمات بشكل كيفي ومن ثم نشكل الشعاع $|u\rangle$ المقابل للحالة الفيزيائية والموافقة للأرقام المعطاة للجسيمات .

2 - نوءثر على الشعاع $|u\rangle$ أما بالموءثر $\hat{S}$ في حالة كون الجسيمات عبارة عن بوزونات أو بالموءثر $\hat{A}$ في حالة كونها عبارة عن فيرميونات .

3 - ننظم الشعاع الذي نحصل عليه .

66 - تطبيق على الجمل المكوّنة من جسيمين متطابقين :

نفرض أنه لدينا جملة مكوّنة من جسيمين متطابقين وأنه يمكننا وصف أحدهما بالشعاع المنظم $|\varphi\rangle$ والآخر بالشعاع المنظم $|\chi\rangle$، ولنوجد الشعاع الفيزيائي الذي يصف حالة الجملة بتطبيق القاعدة السابقة .

1 - نرقم الجسيم الموجود في الحالة $|\varphi\rangle$ بالرقم (1) وذاك الموجود في الحالة $|\chi\rangle$ بالرقم (2) فيكون الشعاع $|u\rangle$ هو :

$$|u\rangle = |1:\varphi, 2:\chi\rangle \qquad (8.70)$$

2 - نوءثر بالموءثر $\hat{S}$ في حالة كون الجسيمين عبارة عن بوزونين حيث أن $\hat{S}$ معطى بالعلاقة (8.16a) فنجد :

$$\hat{S}|u\rangle = \frac{1}{2}\left[|1:\varphi, 2:\chi\rangle + |1:\chi, 2:\varphi\rangle\right] \qquad (8.71)$$

أو نوءثر بالموءثر $\hat{A}$ في حالة كون الجسيمين عبارة عن فيرميونين حيث أن $\hat{A}$ معطى بالعلاقة (8.16b) فنجد :

$$\hat{A}|u\rangle = \frac{1}{2}\left[|1:\varphi, 2:\chi\rangle - |1:\chi, 2:\varphi\rangle\right] \qquad (8.72)$$

3 - ننظم الأشعة الناتجة (8.71) و (8.72) وذلك بفرض أن الشعاعين $|\varphi\rangle$ و $|\chi\rangle$ متعامدان باستبدال الثابت $1/2$ بالثابت $1/\sqrt{2}$ فيصبح الشعاع الفيزيائي الذي يصف الحالة الفيزيائية للجملة :

$$|\varphi, \chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1:\varphi, 2:\chi\rangle + \varepsilon|1:\chi, 2:\varphi\rangle\right] \qquad (8.73)$$

حيث $\varepsilon = 1$ من أجل البوزونات و $\varepsilon = -1$ من أجل الفيرميونات .

في الحالة التي تكون فيها الحالتان $|\psi\rangle$ و $|\chi\rangle$ متطابقتين أي :

$$|\psi\rangle = |\chi\rangle \tag{8.74}$$

فان الشعاع $|u\rangle$ المعطى بالعلاقة (8.70) يصبح :

$$|u\rangle = |1:\psi, 2:\psi\rangle \tag{8.75}$$

ونلاحظ أن الشعاع (8.75) هو شعاع متناظر. وعندما يكون الجسيمان عبارة عن بوزونين فان $\hat{S}|u\rangle = |u\rangle$ وبالتالي فان الشعاع $|u\rangle$ هو الشعاع الفيزيائي الذي يصف حالة جملة مكوّنة من بوزونين الحالة الفردية نفسها $|\psi\rangle$. أما عندما يكون الجسيمان عبارة عن فيرميونين فنلاحظ :

$$A|u\rangle = \frac{1}{2}\left[|1:\psi, 2:\psi\rangle - |1:\psi, 2:\psi\rangle\right] = 0 \tag{8.76}$$

في هذه الحالة لايوجد أي شعاع لامتناظر ينتمي الى $\mathcal{E}_A$ يمكن أن يصف الحالة الفيزيائية لجملة مكوّنة من فيرميونين من نفس الحالة الفردية $|\psi\rangle$ وهذا ينتج مباشرة من تطبيق مسلّمة التناظر المذكورة في الفقرة (63) . نستنتج من هذه الحالة الخاصة نتيجة هامة جداً تعرف تحت اسم " مبدأ الاستبعاد أو مبدأ باولي " وهي : لايمكن لفيرميونين متطابقين أن يشغلا الحالة الكوانتية نفسها في الوقت نفسه.

67 ـ تعميم على جملة مكوّنة من N جسيم $(N>2)$:

نعمم النتائج السابقة على الجمل التي تحتوي على N جسيماً متطابقاً ولتوضيح ذلك سنعالج الحالة $N=3$.

نفرض أنه لدينا جملة مكوّنة من ثلاثة جسيمات متطابقة يمكن وصفها بالأشعة المنظمه والمتعامدة $|\omega\rangle, |\chi\rangle, |\psi\rangle$ فيكون الشعاع $|u\rangle$ حسب الشرط (1) من القاعدة المعطاة في الفقرة (65) من الشكل :

$$|u\rangle = |1:\psi, 2:\chi, 3:\omega\rangle \tag{8.77}$$

نميز بين حالتين : الحالة الأولى وهي الحالة التي تكون فيها الجسيمات عبارة بوزونات والحالة الثانية وهي الحالة التي تكون فيها الجسيمات عبارة عن فيرميونات .

أ – الحالة الأولى " بوزونات " :

نطبق المؤثر $\hat{S}$ على $|u\rangle$ حيث $\hat{S}$ معطى بالعلاقة (8.63) فنجد :

$$\hat{S}|u\rangle = \frac{1}{6}\Big[|1:\psi, 2:\chi, 3:\omega\rangle + |1:\omega, 2:\psi, 3:\chi\rangle + |1:\psi, 2:\omega, 3:\chi\rangle + |1:\chi, 2:\omega, 3:\psi\rangle + |1:\chi, 2:\psi, 3:\omega\rangle + |1:\omega, 2:\chi, 3:\psi\rangle\Big] \quad (8.78)$$

وننظم هذه الحالة باستبدال الثابت $1/6$ بالثابت $1/\sqrt{6}$ فيصبح الشعاع الفيزيائي الذي يصف الحالة الفيزيائية للجملة :

$$|\psi, \chi, \omega\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\Big[|1:\psi, 2:\chi, 3:\omega\rangle + |1:\omega, 2:\psi, 3:\chi\rangle + |1:\chi, 2:\omega, 3:\psi\rangle + |1:\psi, 2:\omega, 3:\chi\rangle + |1:\chi, 2:\psi, 3:\omega\rangle + |1:\omega, 2:\chi, 3:\psi\rangle\Big] \quad (8.79)$$

في الحالة التي يكون فيها $|\chi\rangle \equiv |\psi\rangle$ مع بقائهما معامدين لـ $|\omega\rangle$ فانه يظهر في الطرف الثاني من العلاقة (8.78) ثلاثة حدود مختلفة فقط وبالتالي يصبح الشعاع الفيزيائي الذي يصف الحالة الفيزيائية للجملة ، بعد تنظيمه :

$$|\psi, \psi, \omega\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\Big[|1:\psi, 2:\psi, 3:\omega\rangle + |1:\psi, 2:\omega, 3:\psi\rangle + |1:\omega, 2:\psi, 3:\psi\rangle\Big] \quad (8.80)$$

أما في الحالة التي يكون فيها $|\omega\rangle \equiv |\chi\rangle \equiv |\psi\rangle$ فان الشعاع :

$$|u\rangle = |1:\psi, 2:\psi, 3:\psi\rangle \quad (8.81)$$

هو الشعاع الفيزيائي الذي يصف الحالة الفيزيائية للجملة المكوّنة من ثلاث بوزونات يشغلون نفس الحالة الفردية $|\psi\rangle$.

ب – الحالة الثانية " فيرميونات " :

نطبق المؤثر $\hat{A}$ المعطى بالعلاقة (8.64) على الشعاع $|u\rangle$ المعطى بالعلاقة (8.77) فنجد :

$$\hat{A}|u\rangle = \frac{1}{6}\Big[|1:\psi, 2:\chi, 3:\omega\rangle + |1:\omega, 2:\psi, 3:\chi\rangle + |1:\chi, 2:\omega, 3:\psi\rangle - |1:\psi, 2:\omega, 3:\chi\rangle - |1:\chi, 2:\psi, 3:\omega\rangle - |1:\omega, 2:\chi, 3:\psi\rangle\Big] \quad (8.82)$$

نلاحظ أن اشارات الجمع والطرح في الطرف الثاني من العلاقة (8.82) تخضع للقواعد نفسها التي تخضع لها اشارات الجمع والطرح في معين 3×3 لذلك من المناسب أن نكتب $\hat{A}|u\rangle$ على شكل معين يسمى معين سلاتر :

$$\hat{A}|u\rangle = \frac{1}{3!}\begin{vmatrix} |1:\psi\rangle & |1:\chi\rangle & |1:\omega\rangle \\ |2:\psi\rangle & |2:\chi\rangle & |2:\omega\rangle \\ |3:\psi\rangle & |3:\chi\rangle & |3:\omega\rangle \end{vmatrix} \qquad (8.83)$$

ونلاحظ أن $\hat{A}|u\rangle$ اذا انطبقت حالتان أو أكثر من الحالات الثلاث $|\psi\rangle$ و $|\chi\rangle$ و $|\omega\rangle$ لتساوي عمودين من أعمدة المعين (8.83) بذلك نجد مرة أخرى مبدأ الاستبعاد "أو مبدأ باولي" : لايمكن لمجموعة من الفيرميونات المتطابقة أن تشغل الحالة الكوانتية نفسها في الوقت نفسه . ننظم الحالة المعطاة ب (8.82) أو ب (8.83) باستبدال الثابت $1/3!$ بالثابت $1/\sqrt{3!}$ فيصبح الشعاع الفيزيائي الذي يصف الحالة الفيزيائية لجملة مكوّنة من ثلاث فيرميونات متطابقة:

$$|\psi,\chi,\omega\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}}\, D\left[\,|1:\psi\rangle, |2:\chi\rangle, |3:\omega\rangle\,\right] \qquad (8.84)$$

تعمم النتائج التي حصلنا عليها في آ و ب من أجل جملة مكوّنة من N جسيماً متطابقاً فنجد أنه يمكننا دوماً ايجاد الشعاع الفيزيائي المتناظر $\hat{S}|u\rangle$ الذي يصف الحالة الفيزيائية لـ N بوزوناً اعتباراً من الحالات الفردية $|\psi\rangle, |\chi\rangle, \ldots$ ويمكننا دوماً ايجاد الشعاع الفيزيائي اللامتناظر $\hat{A}|u\rangle$ الذي يصف الحالة الفيزيائية لـ N فيرميوناً على شكل معين سلاتر $N\times N$ بشرط أن تكون جميع الحالات الفردية مختلفة بعضها عن بعض . هذا يوضح كيف يمكن أن تكون نتائج تطبيق المسلّمة الجديدة عندما تكون الجمل مكوّنة من فيرميونات أو من بوزونات .

68 ـ الفروق بين البوزونات والفيرميونات :

يظهر من مسلّمة التناظر أن الفرق بين البوزونات والفيرمونات تافه جداً، ولكن في الحقيقة أن لاختلاف الاشارة في الشعاع الفيزيائي

نتائج هامة جداً. في الواقع أن مسلّمة التناظر لا تضع أية شروط على الحالات الفردية للبوزونات المتطابقة بينما تفرض على الفيرميونات الخضوع لمبدأ الاستبعاد لباولي : لايمكن لفيرميونين متطابقين أن يشغلا الحالة الكوانتية نفسها في الوقت نفسه.

من الجدير بالذكر أن مبدأ باولي قد وضع لايضاح خواص الذرات التي تحتوي على الكترونات متعددة ولكنه الآن يبدو كنتيجة مباشرة لمسلّمة التناظر، وهو ينطبق على جميع الفيرميونات المتطابقة وليس فقط على الالكترونات.

69 - سوية الطاقة الدنيا لجملة مكوّنة من جسيمات متطابقة مستقلة بعضها عن بعض :

ان هاملتوني جملة مكوّنة من جسيمات متطابقة " بوزونات أوفيرميونات " متناظر لتبديلات الجسيمات :

$$[\hat{H}, \hat{P}_\alpha] = 0 \qquad (8.85)$$

حيث $\hat{P}_\alpha$ موءثر تبديل كيفي.

لنفرض أنه لدينا جملة مكوّنة من جسيمات متطابقة مستقلة بعضها عن بعض ، هذا يعني أنه لايوجد تأثير متبادل بينها فيكون هاملتوني الجملة عبارة عن مجموع الهاملتونيات التي تخص كل جسيم على حده :

$$\hat{H}(1,2,\ldots,N) = \hat{h}(1) + \hat{h}(2) + \ldots + \hat{h}(N) \qquad (8.86)$$

حيث $\hat{h}(j)$ تابع فقط للملحوظات الفيزيائية التي تتعلق بالجسيم (j) ، وبما أن الجسيمات متطابقة فان لجميع الحدود في العلاقة (8.86) الشكل نفسه اذن لمعرفة القيم الخاصة والأشعة الخاصة للهاملتوني الكلي $\hat{H}(1,2,\ldots,N)$ يكفي أن نحسب القيم الخاصة والأشعة الخاصة لهاملتوني أحد الجسيمات $\hat{h}(j)$ في فراغ حالات (j) $\mathcal{E}(j)$ ولتكن:

$$\hat{h}(j)\,|\varphi_n\rangle = e_n\,|\varphi_n\rangle \quad : \quad |\varphi_n\rangle \in \mathcal{E}(j) \qquad (8.87)$$

حيث فرضنا أن طيف $\hat{h}(j)$ متقطع وغير منطبق .

في الحالة التي تكون فيها الجملة مكوّنة من بوزونات متطابقة فان الأشعة الخاصة للهاملتوني $\hat{H}(1,2,\dots,N)$ هي الأشعة الناتجة عن الجداءات التنسورية لِ N شعاعاً $|\varphi_n\rangle$ كيفياً بعد تطبيق الموءثر $\hat{S}$ عليها :

$$|\varphi^{(S)}_{n_1,n_2,\dots,n_N}\rangle = C\sum_{\alpha} \hat{P}_{\alpha}\,|1:\varphi_{n_1}\,,\,2:\varphi_{n_2}\,,\,\dots\,,\,N:\varphi_{n_N}\rangle \qquad (8.88)$$

وتكون الطاقة المقابلة هي مجموع N طاقة فردية :

$$E_{n_1,n_2,\dots,n_N} = e_{n_1} + e_{n_2} + \dots + e_{n_N} \qquad (8.89)$$

بشكل خاص اذا كانت e_1 القيمة الخاصة الأصغر للموءثر $\hat{h}(j)$ المقابلة للشعاع الخاص $|\varphi_1\rangle$ فان الحالة الخاصة التي تمثل الحالة الدنيا للجملة هي عندما يكون الـ N بوزون في الحالة نفسها $|\varphi_1\rangle$:

$$|\varphi^{(S)}_{1,1,\dots,1}\rangle = |1:\varphi_1\,,\,2:\varphi_1\,,\,\dots\,,\,N:\varphi_1\rangle \qquad (8.90)$$

التي تقابل القيمة الخاصة :

$$E_{1,1,\dots,1} = N e_1 \qquad (8.91)$$

أما الحالة التي تكون فيها الجملة مكوّنة من فيرميونات متطابقة، فانه، وحسب مبدأ باولي من المستحيل أن تشغل هذه الفيرميونات جميعا الحالة نفسها $|\varphi_1\rangle$ في الوقت نفسه . لايجاد الحالة الدنيا للجملة نفرض أننا نستطيع ترتيب الطاقات e_n بشكل متزايد :

$$e_1 < e_2 < \dots < e_{n-1} < e_n < e_{n+1} < \dots \qquad (8.92)$$

بذلك تكون طاقة الجملة في حالتها الدنيا هي :

$$E_{1,2,\ldots,N} = e_1 + e_2 + \ldots + e_N \quad (8.93)$$

تقابل هذه الطاقة الدنيا الحالة الدنيا المعطاة بالشعاع الفيزيائي:

$$|\Psi^{(A)}_{1,2,\ldots,N}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |1:\varphi_1\rangle & |1:\varphi_2\rangle & \ldots & |1:\varphi_N\rangle \\ |2:\varphi_1\rangle & |2:\varphi_2\rangle & \ldots & |2:\varphi_N\rangle \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ |N:\varphi_1\rangle & |N:\varphi_2\rangle & \ldots & |N:\varphi_N\rangle \end{vmatrix} \quad (8.94)$$

نسمي e_N الطاقة الفردية الأعلى المحققة في الحالة الدنيا بطاقة فيرمي للجملة .

من الجدير بالاشارة أننا قد فرضنا أن سويات الطاقة e_n غير منطبقة ولكنها في الحالة العامة يمكن أن تكون منطبقة لذلك فهي تدخل في المجموع (8.93) عددا من المرات يساوي درجة انطباقها .

في النهاية ان مبدأ باولي يلعب دوراً أساسياً في مجالات الفيزياء التي تدرس جملا مكوّنة من عدد من الالكترونات مثل الفيزياء الذرية والفيزياء الجزئية وفيزياء الجسم الصلب وفي الجمل المكوّنة من عدد من البروتونات والنترونات كما في الفيزياء النووية .

70 ـ الاحصاء الكوانتي :

ان هدف الميكانيك الاحصائي هو دراسة الجمل المكوّنة من عدد كبير من الجسيمات وبما أننا لانعرف الحالة المجهرية للجملة فاننا نكتفي بوصفها بشكل كلّي من خلال بعض صفاتها الجهرية (الضغط ، درجة الحرارة ، الكثافة ، ...) ، ولكن يجب أن نتذكر أن حالة جهرية معينة تقابل في الحقيقة جملة من الحالات المجهرية ، لذلك كان من الضروري تعيين عدد الحالات المجهرية المختلفة ذات الصفات المحددة عند دراسة خاصة جهرية للجملة .

ان الميكانيك الاحصائي الكلاسيكي (احصاء ماكسويل - بولتزمان) يعالج الجسيمات المكوّنة لجملة ما على أنها مختلفة بعضها عن بعض حتى ولو كانت متطابقة وتعيين الحالة المجهرية بالمعطيات التي تحدد الحالات الفردية للجسيمات المكوّنة للجملة وحيث تعتبر حالتين مجهريتين مختلفتين اذا اختلفتا عند تبديل الجسيمات ، على الرغم من أن المعطيات التي تحدد الحالات الفردية للجسيمات المكوّنة للجملة نفسها .

أما في الميكانيك الاحصائي الكوانتي فيجب الأخذ بعين الاعتبار مسلّمة التناظر. وتوصف الحالة المجهرية لجملة جسيمات متطابقة باحصاء الـ N حالة فردية التي تشكلها ، ان احصاء الحالات المجهرية في الميكانيك الاحصائي الكوانتي لن يعطي النتيجة التي يعطيها الميكانيك الاحصائي الكلاسيكي . بالاضافة الى ذلك فان مبدأ باولي يميز بشكل جذري بين الجمل المكوّنة من بوزونات متطابقة وتلك المكوّنة من فرميونات متطابقة : يمكن لعدد كيفي من البوزونات أن يشغل حالة كوانتية واحدة في الوقت نفسه بينما لايشغل حالة كوانتية معينة في الوقت نفسه الا فيرميون واحد. لذلك ندرس البوزونات بواسطة احصاء بوز- انيشتاين وندرس الفيرميونات بواسطة احصاء فيرمي - ديراك .

لتوضيح أهمية مسلّمة التناظر والاحصاءات المستعملة سنورد بعض الأمثلة :

71 - الآزوت 14 والنوترون :

كان البروتون والالكترون الجسيمين الأولين الوحيدين المعروفين حتى عام 1930، وقد تخيل العلماء وحلموا أيضاً بأنهما سيكفيان لتكوين جميع الجمل المركبة ، وهكذا فقد اعتبروا أن نوى الذرات مكوّنة من بروتونات والكترونات ، وكان نموذج النواة على الشكل التالي : بفرض أن لنواة ما عدد كتلي A وعدد ذري Z. فانها تحتوي على A بروتوناً لتعطيها الوزن و $(A - Z)$ الكتروناً لاعطائها

الشحنة

$_{Z}^{A}$نواة = A بروتون + $(A-Z)$ الكترون = $(2A-Z)$ فيرميون

فيكون الاحصاء الذي تخضع له نواة معينة تابعا لازدواجية العدد الكلي من الفيرميونات المكوّنة لها وحسب النموذج المذكور أعلاه فان عددها هو $(2A-Z)$ وبالتالي فانها تتعلق بكون العدد Z فردياً أم زوجياً، فاذا كان Z فردياً فان النواة عبارة عن فيرميون واذا كان زوجياً فهي بوزون . استناداً الى ذلك فان نواة الآزوت 14 ($_{7}^{14}N$) يجب أن تكون فيرميوناً. ولكن طيف الجزيئة N_2 أظهر أن هذه النواة هي بوزون وليست فيرميون ، وبالتالي يجب أن تحتوي على عدد زوجي من الفيرميونات كان ذلك السبب الرئيسي في رفض الفرضية السابقة بكون الالكترونات موجودة داخل النواة واستبدلت بالنوترونات .

من المعلوم أن :

$_{Z}^{A}$نواة = Z بروتون + $(A-Z)$ نترون = A فيرميون

بذلك يكون الاحصاء المرتبط بالنوى متعلقا فقط بكون الرقم الكتلي A زوجيا أو فرديا. في نواة الآزوت $A=14$ رقم زوجي اذن فهي بوزون وليست فيرميوناً .

72 - الكواركات :

نعتبر اليوم أن الجسيمات مكوّنة من تركب جسيمات أولية هي الكواركات فمثلاً ان الباريونات (بروتون ، نوترون ،...) هي عبارة عن فيرميونات يجب أن تشكل من عدد فردي من الفيرميونات لذلك فهي مكونة من اجتماع ثلاث كواركات ، بينما الميزونات مكونة من اجتماع كوارك مع ضديد كوارك وبالتالي فهي بوزونات .

وهكذا فان مبدأ باولي ينطبق على الجسيمات الأولية. ولكن لتفسير استقرار الهادرونات وجب تكوينها من مجموعة من الكواركات بحيث أن مبدأ باولي غير مطبق ، وللخروج من هذا المأزق فقد فرض أن الكواركات ملونة ولها ثلاثة الوان مختلفة وفقط الكواركات المختلفة الالوان يمكن لها أن تجتمع لتشكل هادروناً معيناً. اذن بما ان الكواركات مختلفة

لاختلافها باللون فان مبدأ باولي لم ينتهك وبالتالي فقد لعب مفهوم الفيرميون دوراً هاماً في بناء نظرية الكروموديناميك الكوانتية أو ما تسمى بنظرية الحقول الكوانتية للكواركات الملونة، التي هي الآن النظرية الأساسية للتفاعلات النووية القوية.

73 - فرط السيولة والسائل الكوانتي :

يوجد نوعان من النظائر لنوى الهيليوم : الهيليوم - 3 أو ^3He (2 بروتون + 1 نوترون) والهيليوم - 4 أو ^4He (2 بروتون + 2 نوترون). نلاحظ أن الأول عبارة عن فيرميون $(A=3)$ بينما الثاني عبارة عن بوزون $(A=4)$.

تعتبر المقارنة بين السائل ^3He والسائل ^4He ، في درجات الحرارة المنخفضة $(T \leq 2^\circ K)$ ، أوضح مثال على الفرق بين الفيرميونات والبوزونات ، ويجب الملاحظة هنا أن خواصهما الذرية متطابقة تماماً وذلك لأن عدد الالكترونات في كل منهما متساو (2 الكترون). ولكن نجد أن السائل ^4He ليس له أية لزوجة فيبدأ بالخروج من الوعاء دون أي مشكلة وهذا يرجع الى كونه بوزوناً ففي هذه الدرجة المنخفضة من الحرارة تسعى جميع النوى للوجود في الحالة الدنيا التي تمتلك سوية الطاقة الدنيا ، نسمي هذه الظاهرة بتكثف بوز-انيشتاين، وتتحرك مجتمعة بحيث أنها لاتفقد طاقتها كما تفقد السوائل العادية عند احتكاك ذراتها مع جدرات الوعاء.

تشكل هذه الظاهرة في الحقيقة انتقالا فعليا في الطور " طور فرط السيولة " . بينما لانجد مثل هذا الطور في الهيليوم 3 ولايمكن تفسير هذه الظاهرة الا بالاعتماد على كون ^4He بوزونا و ^3He فيرميونا .

من الجدير بالذكر أن ظاهرة " السوائل " البوزونية تظهر خواصاً تشبه فرط السيولة ، وهي حالة الكترونات الناقلة في بعض المعادن التي تتفاعل بعضها مع بعض بواسطة الاهتزازات الناتجة عن الشبكة البلورية حيث يرتبط بعضها ببعض مثنى مثنى مشكلة ما يسمى (ازواج كوبر) . يمكن اعتبار هذه الأزواج من الالكترونات

بمثابة بوزونات وبالتالي فان فرط سيولتها يعطي للمعدن خاصة فرط الناقلية : ان مقاومة المعدن تنعدم تحت درجة حرارة حرجه كما تنعدم لزوجة السائل الكونتي . ان ازواج كوبر تفسر أيضا ظاهرة فرط الناقلية الشاردية ولكن الأزواج مكوّنة هنا من شوارد .

74- متراجحة هايزنبرغ - باولي :

وجدنا سابقاً أن مفهوم الحالة مختلف كلياً في الميكانيك الكوانتي عنه في الميكانيك الكلاسيكي . حيث أن حالة جسيم تعين تماماً بمعرفة موضعه ودفعه في الميكانيك الكلاسيكي ويمكن تمثيلها بدقة في فراغ الأطوار . أما من الناحية الكوانتيه وحسب متراجحة هايزنبرغ :

$$\Delta P_x \cdot \Delta x \geqslant \hbar \qquad (8.92)$$

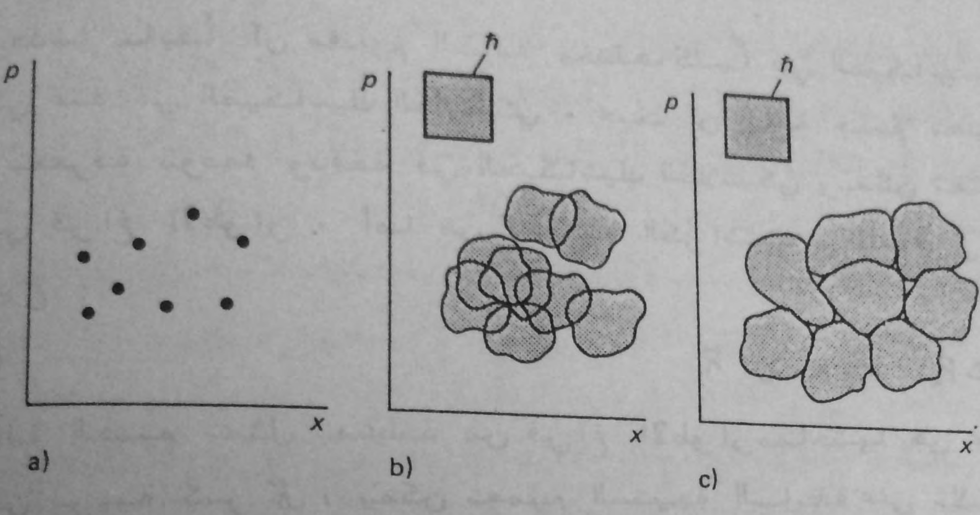
فان حالة الجسيم تمثل بمنطقة من فراغ الأطوارمساحتها هي على الأقل من مرتبة كبر $\hbar$ ، يمكن تعميم النتيجة السابقة على ثلاثة أبعاد حيث أن متراجحة هايزنبرغ تكتب بالشكل :

$$\left.\begin{aligned} \Delta P_x \cdot \Delta x &\geqslant \hbar \\ \Delta P_y \cdot \Delta y &\geqslant \hbar \\ \Delta P_z \cdot \Delta z &\geqslant \hbar \end{aligned}\right\} \qquad (8.93)$$

أي أنه يجب أن تمثل حالة الجسيم في فرّاغ الأطوار ذي الأبعاد الستة بخلية من قياس $\hbar^3$.

بفرض الآن أننا ندرس جملة مكوّنة من N جسيماً. تمثل حالة الجملة ، من الناحية الكلاسيكية ، بتوزع معين لِ N نقطة من فراغ الأطوار . أما من الناحية الكوانتية فتمثل حالتها بـ N منطقة في فراغ الأطوار قياس كل واحدة منها من قياس $\hbar$ على بعد واحد) ومن قياس $\hbar^3$ (على ثلاثة أبعاد) ، الشكل (8.3) ، وتعتمد خواص الجملة على الحجم الكلي لهذه المناطق . اذا كونت الجملة منطقة أبعادها هي Δl و ΔP على محاور الموضع والدفع على الترتيب فان هذه الأبعاد هي الأبعاد التي تصف القياسات على محوري الموضع والدفع،

فاذا كانت الجملة مكوّنة من N فيرميوناً متطابقاً فان حالتها تمثل في فراغ الطور حسب مبدأ باولي من اجتماع N منطقة مختلفة ويكون الحجم الكلي لهذه المنطقة من مرتبة $N\hbar^3$. ترتبط هذه القيمة مع الأبعاد التي تضف القياسات على محوري الموضع والدفع بالعلاقة :



شكل (8.3) فضاء الحالات

a) تمثل حالة جملة مكونة من N جسيماً، من الناحية الكلاسيكية، بشكل معين لـ N نقطة منه .

b) تمثل حالة جملة مكونة من N جسيماً، من الناحية الكوانتية، بـ N منطقة من قياس $\hbar$ ، وذلك حسب متراجحة هايزنبرغ ،ويمكن للمناطق ان تتقاطع .

c) تمثل حالة جملة مكوّنة، من N فيرميون متطابق، من اجتماع N منطقة مختلفة حسب مبدأ باولي .

(8.97)

$$(\Delta p)^3 (\Delta \ell)^3 \gtrsim N\hbar^3$$

أو أيضاً :

(8.98)

$$\Delta p \cdot \Delta \ell \gtrsim N^{1/3}\hbar$$

نسمي العلاقة (8.98) متراجحة هايزنبرغ - باولي .

بمقارنة هذه العلاقة مع متراجحة هايزنبرغ العادية التالية :

$$\Delta p . \Delta \ell \gtrsim \hbar \qquad (8.99)$$

نجد أنه يمكننا استبدال الطرف الثاني من العلاقة (8.98) بثابت بلانك فيرميوني فعّال من الشكل :

$$\hbar_f (N) = N^{4/3} \hbar \qquad (8.100)$$

نلاحظ من هذه العلاقة أنه بزيادة N فان $\hbar_f(N)$ تزداد. نستطيع القول اذن أن لاتناظر التابع الموجي الفيرميوني يضخم الظواهر الكوانتيه ، التي توضحها متراجحة هايزنبرغ ، بشكل كبير عندما يكون عدد الفيرميونات المتطابقة N كبيراً.

75 - الـــــذرات :

سندرس الآن أثر مبدأ باولي على المواد العادية ونقصد بالمواد العادية المواد الموجودة في الطبيعة من حولنا حيث نعتبر أن القوى الكولونية هي القوى الوحيدة التي تتحكم فيها في حالتها الدنيا.

لتكن لدينا ذرة عددها الذري Z أي أنها تحتوي على Z الكتروناً. بفرض أن الالكترون ليس فيرميوناً هذا يعني أن الحالة الدنيا للذرة التي تحتوي على Z الكتروناً تحسب من كمية حركتها وموضعها آخذين بعين الاعتبار متراجحة هايزنبرغ فمن أجل نواة شحنتها $+Z q_e$ حيث q_e شحنة الالكترون، فان لكل الكترون طاقة دنيا من مرتبة $-Z^2 E_H$ وذلك باهمال التفاعل بين الالكترونات حيث $E_H = \frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 = \frac{me^4}{2\hbar^2}$ سوية الطاقة الدنيا لذرة الهيدروجين،

بذلك تكون طاقة الذرة من مرتبة :

$$E_Z \simeq -Z^3 E_H \qquad (8.101)$$

ويكون نصف قطرها الموافق لهذه الطاقة :

$$r_Z \simeq Z^{-1} a_0$$

حيث $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ نصف قطر مدار بور لذرة الهيدروجين . بما أن

ادخال التفاعل المتبادل بين الالكترونات لن يغير في تابعية r_Z لِـ Z فان حجم الذرة سينقص بزيادة عددها الذري Z، وهكذا فان حجم ذرة اليورانيوم يجب أن يكون أصغر بمئة مرة تقريبا من ذرة الهيدروجين .

لكن التجربة تثبت أن حجم الذرات كلها من مرتبة الأنغشتروم $(1 \mathring{A} = 10^{-10} m)$. لازالة هذا التناقض نوضح هنا أننا استعملنا متراجحة هايزنبرغ للحصول على الطاقة وبما أن الالكترونات عبارة عن فيرميونات فيجب أن نطبق متراجحة هايزنبرغ - باولي (8.98)، اذن يجب أن نبدل $\hbar$ بـ $\hbar_f$ التالية :

$$\hbar_f(Z) = Z^{1/3}\hbar \tag{8.103}$$

بتبديل العلاقة (8.103) في العلاقتين (8.101) و (8.102) نجد :

$$E_Z^f \simeq -Z^{7/3} E_H \tag{8.104}$$

$$r_Z^f \simeq Z^{-1/3} a_0 \tag{8.105}$$

في الحقيقة أن البنية الذرية أكثر تعقيداً مما ذكرنا سابقاً. بفرض أن الذرة تحتوي على الكترون واحد فان أنصاف أقطار السويات المثارة لهذه الذرة تزداد بشكل دائم. في هذه الشروط فان التفاعل المتبادل بين الالكترونات الذي أهملناها حتى الآن سيلعب دورا كبيراً بفرض أننا استعملنا Z حالة مختلفة من أجل بناء الحالة المشتركة، بذلك يحجب الـ $(Z-1)$ الكتروناً داخلياً شحنة النواة وهي Zq_e عن الالكترون الموجود في الحالة الأخيرة فكما لو أن هذا الالكترون يتأثر بشحنة فعّالة للنواة هي $Zq_e - (Z-1)q_e = q_e$، بذلك تقارن حالته بالحالة الدنيا لذرة الهيدروجين . هكذا كما تعتبر الكيمياء ان حجم الذره هو آخر منطقة يمكن أن نجد فيها الكتروناً وهذا الحجم هو بشكل أساسي حجم ذرة الهيدروجين نفسه. تظهر العلاقة (8.105) أن توزع الشحنات الالكترونية غير متجانس وانه يكون مُركّزاً أكثر

بزيادة Z . ولكن المنطقة الخارجية لهذا التوزع تظل من الشكل الهيدروجيني الأمر الذي يوضح ثبات حجم الذرات وثبات طاقة التشرد، أي الطاقة اللازمة لاقتلاع الكترونا من الذرة ، فهي دوما من مرتبة بضعة الكترونات فولط .

76 - المادة الجهرية :

ان بعض خواص المواد الجهرية لاتعتمد على كميتها أو بكلمة أخرى على عدد الجسيمات المكوّنة لها. فمثلا يتبخر الماء تحت ضغط معين عند درجة الحرارة نفسها، مهما كانت كميته . أما كثافة الحديد لِ 1 كغ منه أو لطن منه فهي نفسها تحت الظروف نفسها. غير أن هناك مجموعة من الخواص التي تعتمد على عدد الجسيمات المكوّنة للمادة مثل الحجم وطاقة الارتباط . في الحقيقة ان خواص المادة تبقى متجانسة لأن طاقة الارتباط $E_0(N)$ في جملة مكونة من N ذرة تزداد بشكل خطي مع زيادة عدد ذراتها .

هذا يعني أنه يجب أن يكون لدينا :

$$E_0(N) \propto N \qquad (8.106)$$

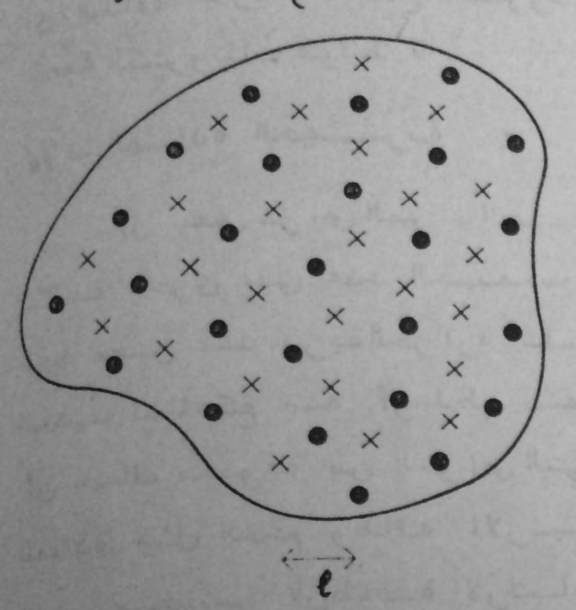
ولكن طاقة ارتباط الجسيم ε مستقلة عن العدد N اذن :

$$\varepsilon(N) = \frac{1}{N} \, |E_0(N)| \propto Cont. \qquad (8.107)$$

نلاحظ أن هذا الشرط محقق من أجل المواد العادية اذ أننا نحتاج لبضعة الكترونات فولط لاقتلاع ذرة من قطعة ثلج أو من جبل جليد. فنقول أن القوى الكولونية في حالة اشباع . ولمحاولة فهم حالة الاشباع هذه نفرض أنه لدينا جملة متعادلة كهربائياً مكوّنة من N جسيماً موجباً شحنة كل منها $+q_e$ و N جسيماً سالباً شحنة كل منها $-q_e$ (N بروتون و N الكترون على سبيل المثال) . ان الطاقة الكامنة للجملة تنتج من التعادل بين قوى التنافر وقوى التجاذب الكولونية . بذلك فان كل جسيم يحاول أن يتعادل مع الجسيمات التي تخالفه الشحنة وتحجبه عن الشحن الأخرى المماثلة. تكون الطاقة

الكامنة للجملة اذن هي طاقة N جسيما يتفاعل كل منها مع شحنة فعّالة تخالفه بالشحنة وتبعد عنه مسافة l الذي هو متوسط البعد بين جسيمين متجاورين الشكل (8.4) :

$$V = -N \frac{e^2}{l} \qquad (8.108)$$



شكل (8.4)
جملة كولونيـة

N شحنة موجبة (●) و N شحنة سالبة (×) تشغل حجما قياسه L ان متوسط البعد بين جسيمين متجاورين هو l وهو مرتبة قياس الحجم الذي يشغله جسيماً واحداً .

من الناحية الكلاسيكية ان العلاقة (8.108) لاتثير مشكلة حالة الاشباع ولا حتى استقرار الجملة حيث أننا نجد أنه من أجل $l \to 0$ فان $V \to \infty$ أي أنه لايوجد طاقة دنيا .

لندرس الجملة اذن من الناحية الكوانتية فنجد أن الطاقة الحركية لها :

$$E_{cin} = N \frac{\bar{P}^2}{2M} + N \frac{\bar{p}^2}{2m} \qquad (8.109)$$

حيث أن m و $\bar{p}$ كتلة ودفع الجسيم السالب الوسطى مثلا و M و $\bar{P}$ كتلة ودفع الجسيم الموجب الوسطى ، ولكن لدينا $M \gg m$ لذلك نهمل الطاقة الحركية للجسيم الموجب وتصبح الطاقة الكلية للجملة :

$$E = N \frac{\bar{p}^2}{2m} - N \frac{e^2}{l} \qquad (8.110)$$

تظهر العلاقة الأخيرة أن E خطية مع N . بفرض أن كل جسيم من الجملة يستطيع أن يغير بوضعه بمقدار L هذا يعني استناداً المتراجحة

هايزنبرغ :

$$p.L \geq \hbar \qquad (8.111)$$

ولكن ℓ تمثل متوسط البعد بين جسيمين متجاورين هذا يعني أن حجم الجملة الكلي يعطى بالعلاقة :

$$L^3 = N\ell^3 \qquad (8.112)$$

أو بشكل آخر :

$$\ell = N^{-1/3} L \qquad (8.113)$$

بذلك يمكننا أن نحسب (8.110) بدلالة L كما في الشكل :

$$E \geq N \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{L^2} - N^{4/3} \frac{e^2}{L} \qquad (8.114)$$

ان هذه الطاقة لها قيمة دنيا هي :

$$E_0(N) \simeq - N^{5/3} E_H \qquad (8.115)$$

من أجل قيمة L التالية :

$$L \simeq N^{-1/3} a_0 \qquad (8.116)$$

نلاحظ أن الجملة مستقرة لوجود طاقة دنيا ولكن بدون حالة اشباع حيث نجد أن كثافة الجملة :

$$\rho = \frac{N}{L^3} \simeq N^2 a_0^{-3} \qquad (8.117)$$

تزداد بشكل سريع مع زيادة N مثلها مثل طاقة ارتباط الجسيم :

$$\varepsilon = \frac{|E_0(N)|}{N} \simeq N^{2/3} E_H \qquad (8.118)$$

لاظهار جسامة الخطأ في النتائج لنفرض أن الجملة عبارة عن غرام واحد من الهيدروجين هذا يعني $N \simeq 10^{24}$ وهذا يعني حسب العلاقة (8.116)، أن هذه الجملة تشغل حجماً قياسه 10^{-8} Å أن واننا نحتاج الى طاقة $10^{16} E_H = 10^{-2}$ Joule لاقتلاع ذرة واحدة حسب

العلاقة (8.118) . ان الخطأ الذي حصلنا عليه سببه أننا استعملنا متراجحة هايزنبرغ وبما أن الالكترونات عبارة عن فيرميونات يجب أن نستعمل متراجحة هايزنبرغ – باولي أي أنه يجب أن نستبدل $\hbar$ ب $\hbar_f = N^{1/3}\hbar$ الأمر الذي يعطينا بأن بعد الجملة :

$$L_f \simeq N^{1/3} a_0 \qquad (8.119)$$

وكثافتها :

$$\rho_f \simeq a_0^{-3} \qquad (8.120)$$

وطاقتها الدنيا :

$$E_0^f(N) \simeq -N E_H \qquad (8.121)$$

وطاقة ارتباط الجسيم :

$$\varepsilon \simeq E_H \qquad (8.122)$$

ان العلاقة الأخيرة تظهر أن هناك حالة اشباع والعلاقة (8.120) تبين أن كثافة المادة لاتتعلق بعدد الجسيمات المكوّنة لها.

يجب أن نشير هنا أن هذه النتائج تتعلق بالخواص الفيرميونية لنوع واحد من الجسيمات المشحونة فقط . وان الطاقة الحركية للالكترونات تكفي لموازنة طاقة التجاذب الكولونية الفعّالة .

ان هذه النتائج تتوافق مع النتائج التجريبية مهما كان الاحصاء الذي تخضع له النوى ، حتى ولو أن بعض خواص المادة يتعلق باحصاء النوى (مقارنة ^3He و ^4He) فان وجود المادة نفسها وخواصها النوعية (كثافة ، طاقة ارتباط ...) لاتتعلق به .

من الجدير بالذكر أن مشكلة الاشباع الكوانتي للقوى الكولونية اكتشفت وأوجد حلها حيث بواسطة ديسون ولينارد (Dyson et Lenard) عام (1965) . حيث أن النظرية الكوانتية هي التي أوضحت هذه المسألة.

77 – الكواكب والأقمار والأقزام البيضاء :

اذا جعلنا عدد عناصر الجملة N يزداد فسنصل الى مرحلة تصبح

فيها قوى الجاذبية هي القوى ذات الأثر الأكبر . بالرغم من أن قوى الجاذبية أصغر بكثير من القوى الكولونية على المستوى الفردي بين الجسيمات الا أنها تصبح ذات مفعول أكبر بازدياد عدد عناصر الجملة وذلك لأنها لا تحتوي على قوى تنافر ولأن ظاهرة الحجب غير موجودة فيها. لنفرض أنه لدينا جملة تحتوي على N ذرة كتلة كل منها M وتتميز بالبعد L أن قوى الجاذبية تتناسب مع عدد الأزواج التي يتفاعل بعضها مع بعض أي أنها تتناسب مع $N(N-1)/2 \simeq N^2/2$ (حيث $N \gg 1$) . بذلك يمكن كتابة الطاقة الجاذبية الكامنة للجملة على الشكل :

$$V_{grav} \simeq -N^2 \frac{GM^2}{L} \qquad (8.123)$$

حيث $G = 6.67 \times 10^{-11}\ m^3/kg.s^2$ ثابت نيوتن . بمقارنة العلاقة (8.123) مع الطاقة الكولونية الكامنة آخذين بعين الاعتبار ظاهرة الحجب (8.114) :

$$V_{el} \simeq -N^{4/3} \frac{e^2}{L} \qquad (8.124)$$

نلاحظ أن V_{grav} مهملة أمام V_{el} عندما تكون N صغيرة ، وتصبح من نفس مرتبة الكبير عندما نأخذ القيمة الانتقالية :

$$N_t \simeq \left(\frac{e^2}{GM^2}\right)^{3/2} \qquad (8.125)$$

أما في الحالة التي تكون فيها $N > N_t$ فان قوى الجاذبية تكون مسيطرة وتكون الجملة في حالتها الدنيا عندما تكون طاقتها الكلية أصغرية ، لتكن E طاقة الجملة الكلية حيث :

$$E \simeq N^{5/3} \frac{\hbar^2}{2mL^2} - N^2 \frac{GM^2}{L} \qquad (8.126)$$

حيث أن الطاقة الحركية هي طاقة الالكترونات الموجودة في الجملة والتي درسناها كفيرميونات . نحصل على الطاقة الدنيا من أجل :

$$L \simeq N^{-1/3} \frac{\hbar^2}{GM^2 m} \qquad (8.127)$$

وهذا واضح $M_0 = NM$

نلاحظ أن أبعاد الجملة تنقص بزيادة كتلتها

من (8.123) لأن طاقة الجاذبية تزداد بسرعة أكبر زيادة الطاقة الحركية عندما تزداد N . وهكذا فان أبعاد الجملة يجب أن تأخذ قيمة عظمى من أجل $N \simeq N_t$. يمكننا تقدير هذه الأبعاد عندما تكون طاقة الجاذبية من نفس مرتبة كبر الطاقة الكولونية من العلاقتين (8.119) و (8.127) :

$$L_t \simeq \left(\frac{e^2}{GM^2}\right)^{1/2} \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (8.128)$$

توافق هذه الأبعاد الكتلة $\mathcal{M}_t = N_t M$:

$$\mathcal{M}_t \simeq \left(\frac{e^2}{GM^2}\right)^{3/2} M \quad (8.129)$$

لنحسب هذه المقادير عندما تكون الجملة مكونة من مادة خفيفة، الهيدروجين مثلا ($M = m_p = 1.66 \times 10^{-27}$ kg)، أو من مادة ثقيلة، الحديد مثلا ($M \simeq 60 m_p$) فنجد من أجل المادة الخفيفة :

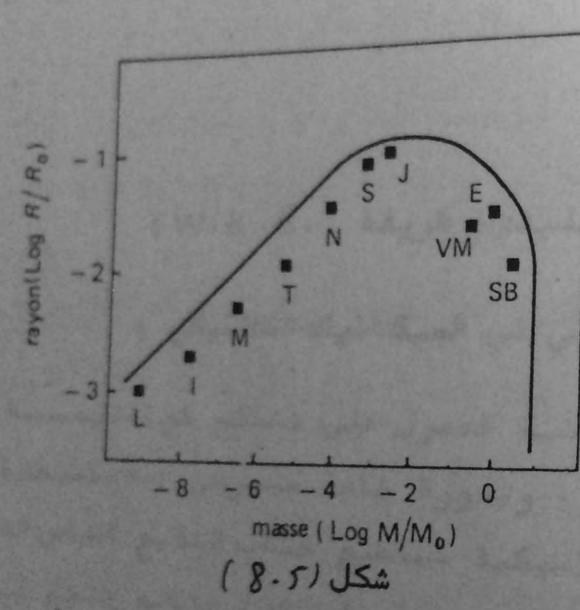
$$N_t = 1.4 \times 10^{54} \;,\; L_t = 5.9 \times 10^4 \text{ km} \;,\; \mathcal{M}_t = 1.7 \times 10^{27} \text{ kg}$$

أما من أجل المادة الثقيلة فنجد :

$$N_t = 6.5 \times 10^{48} \;,\; L_t = 9.8 \times 10^2 \text{ km} \;,\; \mathcal{M}_t = 1.1 \times 10^{22} \text{ kg}$$

نلاحظ أن هذه المقادير تمثل أبعاد الأجسام الكونية، وهكذا نجد أن الكواكب والأقمار تتبع النتائج التي تحصلنا عليها، الشكل (5.8) من الجدير بالذكر أن النجوم لاتخضع للنتائج نفسها حيث أن نصف قطر الشمس ($R_\odot \simeq 0.7 \times 10^6 \text{ km} \gg L_t$) وذلك لأننا درسنا الجمل في حالتها الدنيا والنجوم توجد في حالات مثارة لذلك فهي تشع . اذن لدراسة النجوم يجب أن نأخذ بعين الاعتبار طاقتها الحرارية . حيث أن ضغطها الترموديناميكي الناتج عن حرارتها العالية هو الذي يوازن قوى الجاذبية لتبق في هذا الحجم وليس الطاقة الحركية الكوانتية لالكترونها المعتبرة كفيرميونات . غير أنه عندما تستهلك النجوم طاقتها الداخلية فان درجة حرارتها ستنخفض وبالتالي ضغطها

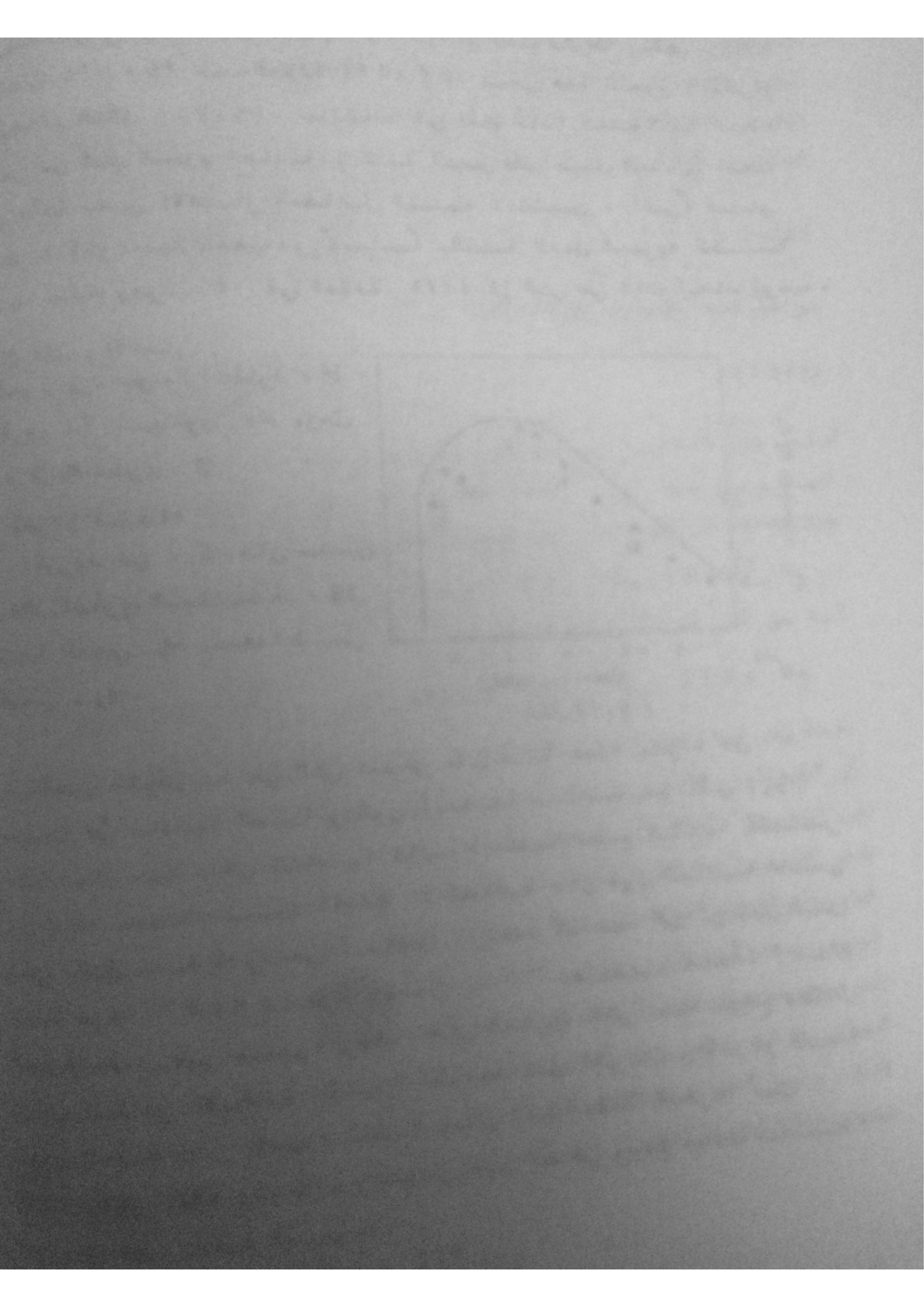
الترموديناميكي وتصبح قوى الجاذبية هي القوى المسيطرة فان هذه النجوم تتقلص باحثة عن توازن جديد ناتج عن مبدأ باولي ومحققة الشروط التي وجدناها من أجل $N > N_t$: ان نصف قطرها ينقص بزيادة كتلتها $M_0 = NM$ حسب العلاقة (8.127). نسمي هذه النجوم (الأقزام البيضاء) الشكل (8.5). بالاضافة الى ذلك فاذا كانت كتلة الجملة اكبر من كتل النجوم العادية (كتلة الشمس على سبيل المثال) فيجب أن نأخذ بعين الاعتبار المفاعيل النسبية لانشتين. أخيراً فان النظرية الكوانتية تلعب دوراً حاسماً بالنسبة للجمل الجهرية كما يشهد بذلك وجود $\hbar$ في العلاقة (8.128) التي هي ذات أبعاد كونيه.



الكواكب والأقمار :
القمر = L ، ايو = I ، عطارد = M
الأرض = T ، نيبتون = N ، زحل = S ، المشتري = J .
الأقزام البيضاء :
ايريداني = E ، فان مانين = VM ، الشعّري اليمانية = SB
كتلة الشمس M_0 ، نصف قطر الشمس = R_0 .

شكل (8.5)

ان القوى الكولونية هي التي تسيطر على حالة جملة مكوّنة من N جسيما في حالتها الدنيا وتكون أبعادها متناسبة مع الأس (1/3) لكتلتها. حيث تبقى كثافتها ثابتة. عندما تصبح كتلتها أكبر من كتلة معينة نسميها الكتلة الانتقالية فان قوى الجاذبية هي التي تكون مسيطرة وتصغر أبعادها بزيادة كتلتها الى أن تصل الى كتلة حرجة " كتلة شاندرا زيخار Chandrasekhar " فان الجملة تصبح غير مستقرة وهكذا فان النظرية الكوانتية توضح بشكل كيفي المظاهر الأساسية للأشياء الكونية مثل الكواكب والأقزام البيضاء تمثل النقاط هذه الأشياء بينما يمثل الخط العلاقة النظرية بين كتلة وقطر جملة مكونة من الهيدروجين الصافي ويضع بذلك حدا للمناطق الفيزيائية المسموحة.



الطرق التقريبية في ميكانيك الكم

آ ـ طريقة التقريب شبه التقليدي (طريقة .W.K.B)

78 ـ معادلة هاملتون ـ جاكوبي في الميكانيك الكلاسيكي :

سنرى في هذه الفقرة امكانية الحصول على نتائج كوانتية انطلاقاً من اعتبارات كلاسيكية . وبصورة خاصة سنبرهن أنه باستخدام معادلة هاملتون ـ جاكوبي الكلاسيكية نستطيع حساب التابع الخاص الذي يصف الجسيم كما أن الشروط الحدية الموضوعة على هذا التابع تسمح لنا بحساب الطاقة .

لنبدأ أولا باستنتاج معادلة هاملتون ـ جاكوبي ولهذا نكتب عبارة الطاقة :

$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + V \quad (9.1)$$

وكذلك :

$$\mathcal{L} = T - V$$

وعندئذ نعرف تابع الفعل $S(t)$ بالعلاقة :

$$S(t) = \int \mathcal{L}\, dt = \int_0^t (2T - E)\, dt = S - Et \quad (9.2)$$

حيث رمزنا بـ S للمقدار :

$$S = \int_0^t 2T\,dt \qquad (9.3)$$

الذي لايتعلق بالزمن بصورة صريحة ، فهو يتبع الزمن من خلال (x,y,z)،
ولبرهان ذلك نحسب dS بطريقتين :
<u>الأولى</u> : نلاحظ من (9.3) حيث نجد مباشرة :

$$dS = 2T\,dt = m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2)dt = P_x\,dx + P_y\,dy + P_z\,dz \qquad (9.4)$$

<u>الثانية</u> : نفاضل S باعتباره ثابت للاحداثيات والزمن فنجد :

$$dS = \frac{\partial S}{\partial x}dx + \frac{\partial S}{\partial y}dy + \frac{\partial S}{\partial z}dz + \frac{\partial S}{\partial t}dt \qquad (9.5)$$

وبمقارنة (9.4) مع (9.5) نجد بسهولة $(\partial S/\partial t) = 0$ أي أن S لايحوي الزمن بشكل صريح. وعندئذ نستنتج من المعادلتين السابقتين أن :

$$\vec{P} = \text{grad}\, S \qquad (9.6)$$

ثم بالتبديل في (9.1) نحصل على معادلة هاملتون ـ جاكوبي المستقرة التالية :

$$\frac{1}{2m}(\text{grad}\, S)^2 + V - E = 0 \qquad (9.7)$$

أما المعادلة غير المستقرة (المتعلقة بالزمن) فيمكن الحصول عليها بالاعتماد على (9.2) حيث نجد :

$$\text{grad}\, S(t) = \text{grad}\, S \;;\; E = -\frac{\partial S(t)}{\partial t}$$

وبالتبديل في المعادلة المستقرة (9.7) نجد المعادلة التالية :

$$\frac{1}{2m}[\text{grad}\, S(t)]^2 + V + \frac{\partial S(t)}{\partial t} = 0 \qquad (9.8)$$

فالمعادلتان (9.7) و (9.8) تقابلان معادلتي شرودنغر المستقرة وغير المستقرة اللتين رأيناهما في الفصل الثاني .
لنحسب S عندما $V = 0$ (الجسيم حر) ويكون $\vec{P} = \text{Const.}$ و $E = \text{Const.}$

وعندئذ نجد من (9.4) أن $S = \vec{P}.\vec{r}$ أما تابع الفعل المتعلق بالزمن فيساوي طبقاً لـ (9.2) :

$$S(t) = \vec{P}.\vec{r} - Et \quad (9.9)$$

وبالاعتماد على (2.1) (الفصل الثاني) نحصل على التابع الموجي لجسيم حر :

$$\psi(t) = A\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{P}.\vec{r} - Et)} = A\, e^{\frac{i}{\hbar}S(t)} \quad (9.10)$$

أما عندما لايتعلق التابع بالزمن فاننا نجد :

$$\psi = A\, e^{\frac{i}{\hbar}S} \quad (9.11)$$

79 - استنتاج معادلة هاملتون - جاكوبي من معادلة شرودنغر :

لنكتب معادلة شرودنغر بالشكل :

$$(H - E)\psi = \left(\frac{P^2}{2m} + V - E\right)\psi = 0 \quad (9.12)$$

فاذا علمنا أن $P = -i\hbar\nabla$ وحسبنا $P^2\psi$ فاننا نجد :

$$P^2\psi = PP\,A e^{\frac{i}{\hbar}S} = PA(-i\hbar\nabla e^{\frac{i}{\hbar}S}) = -i\hbar P \frac{i}{\hbar}\nabla S A e^{\frac{i}{\hbar}S} =$$

$$= P\nabla S\psi = -i\hbar\nabla(\nabla S\psi) = -i\hbar\nabla^2 S + (\text{grad}\, S)^2$$

وبالتعويض في (9.12) نحصل على المعادلة التالية :

$$\frac{1}{2m}(\text{grad}\, S)^2 + (V - E) - \frac{i\hbar\nabla^2 S}{2m} = 0 \quad (9.13)$$

ولكي تتطابق مع المعادلة (9.8) يجب أن يهمل الحد الأخير أمام الحد الأول الذي يتناسب مع $\hbar$ وهذا طبيعي عند الانتقال من

الميكانيك التقليدي الى ميكانيك الكم ، وهكذا يجب أن يتحقق ما يسمى بالتقريب شبه التقليدي التالي :

$$(\text{grad}\ S)^2 \gg \hbar\,|\nabla^2 S|$$

ولكن $\vec{P} = \text{grad}\ S = \nabla S$ وبالتالي $\nabla^2 S = \nabla.\nabla S = \text{div}\ P$ وبالتعويض في العلاقة السابقة نحصل على المتراجحة : $\frac{\hbar}{P^2}\,|\text{div}\ P| \ll 1$

وفي حالة بعد واحد يكون $\text{div}\ P = dP/dx$ ومنه نجد أخيراً :

$$\frac{\hbar}{P^2}\left|\frac{dP}{dx}\right| = \frac{d(\hbar/P)}{dx} = \frac{d\lambda}{2\pi dx} \ll 1 \qquad (9.14a)$$

وهذا يعني أن شرط تطبيق التقريب شبه التقليدي على جملة ما هو أن يكون طول موجة دوبروي لها ثابتاً أو يتغير تغيراً طفيفاً جدا بالنسبة للبعد x . واذا علمنا أن $P = \sqrt{2m(E-V)}$ وحسبنا المشتق في العلاقة الأخيرة فاننا نجد شكلاً آخر لشرط التقريب شبه الكلاسيكي هو :

$$\frac{\hbar}{P^2}\,\frac{dP}{dx} = -\frac{m\hbar}{P^3}\,\frac{\partial V}{\partial x} = \frac{mF\hbar}{P^3} \ll 1 \qquad (9.14b)$$

حيث $F = -\partial V/\partial x$ هي القوة التي تؤثر على الجسيم .

نلاحظ أخيراً أنه لايمكن تطبيق التقريب شبه الكلاسيكي عندما ينعدم الاندفاع $\vec{P}$ للجسيم لأن المتراجحة $(9.14b)$ لن تتحقق أبداً .

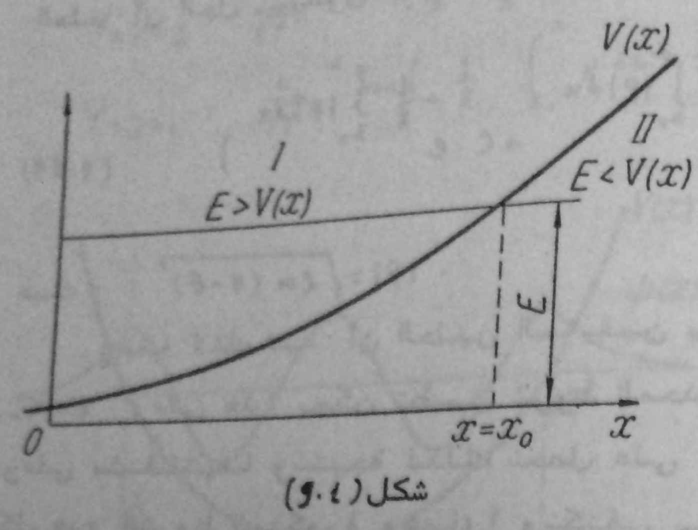
80 – طريقة .W. K. B لحل المعادلة (9.13) :

لقد بذلت عدة محاولات لحل المعادلة (9.13) ونجحت أخيراً على يد ثلاثة علماء هم : Wenzel , Kramers , Brillouin ، وقد سميت طريقتهم لحل المعادلة المذكورة بطريقة (.W. K. B) وسنشرح هذه الطريقة فيما يلي:

لنفرض أن الكمون $V(x)$ تابع مستمر لـ x ولنرسم هذا الكمون شكل (9.1) فنلاحظ أن مجال تحول x ينقسم الى قسمين:

1 – على يسار $x = x_0$ حيث $E > V(x)$.

٢- على يمين $x = x_0$ حيث $E < V(x)$.



شكل (9.2)

أما في النقطة $x = x_0$ فمن الواضح أن $E = V$ نحل أولاً المعادلة (9.13) في المجال $x < x_0$ حيث $E > V$ ، ونكتبها بالشكل :

$$\dot{S}^2 - i\hbar \ddot{S} = 2m(E - V) = P^2 > 0 \qquad (9.16)$$

ونبحث عن الحل كما يلي : $S = S_0 + S_1 + S_2 + \cdots$

حيث S_0 تحوي على $\hbar^0$ و S_1 تحوي على $\hbar^1$ .. وهكذا. وسنهمل كافة الحدود التي تتناسب مع $\hbar^2$. وبالتعويض في (9.16) نجد :

$$\dot{S}_0^2 + 2\dot{S}_0\dot{S}_1 - i\hbar\ddot{S}_0 = P^2$$

فاذا ساوينا بين الحدود من المرتبة نفسها بالنسبة لقوى $\hbar$ فاننا نجد :

$$\dot{S}_0^2 = P^2 \ , \ 2\dot{S}_0\dot{S}_1 = i\hbar\ddot{S}_0$$

ومنه :

$$S_0 = \pm\int_x^{x_0} P\,dx \ , \ S_1 = i\hbar \ln\sqrt{P}$$

وبالتالي يكون الحل :

$$S = S_0 + S_1 = \pm\int_x^{x_0} P\,dx + i\hbar \ln\sqrt{P} \qquad (9.17)$$

وعندئذ نكتب الحل العام في المجال $x < x_0$ (تقريب أول) كما يلي، (بعد ملاحظة أنه جيبي) :

$$\psi_{x<x_0} = \frac{1}{\sqrt{P}}\left(A\cos\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_0} P\,dx + B\sin\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_0} P\,dx\right) \qquad (9.18)$$

وبالطريقة نفسها نحسب الحل في المجال $x > x_0$ حيث P^2 سالبا (بعد

العلم أن الحل سيكون أسيا) :

$$\psi_{x>x_0} = \frac{1}{\sqrt{|P|}}\left(D\, e^{\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{x}|P|dx} + C\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{x}|P|dx} \right) \qquad (9.19)$$

حيث : $|P| = \sqrt{2m(V-E)}$.

ومما لاشك فيه أن الحلين السابقين يجب أن يتطابقا في النقطة $x = x_0$ وعلى هذا يمكن تطبيق شروط المحدودية والاستمرار عليهما وعلى مشتقاتهما ونتيجة لذلك نحصل على زوجين من التوابع يحققان كل هذه الشروط المذكورة وهما، (ونكتفي بايراد النتيجة) :

$$\left.\begin{aligned} \psi_{x<x_0} &= \frac{a}{\sqrt{P}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_0} P\,dx + \frac{\pi}{4}\right) \\ \psi_{x>x_0} &= \frac{a}{2\sqrt{|P|}}\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{x}|P|dx} \end{aligned}\right\} \qquad (9.20)$$

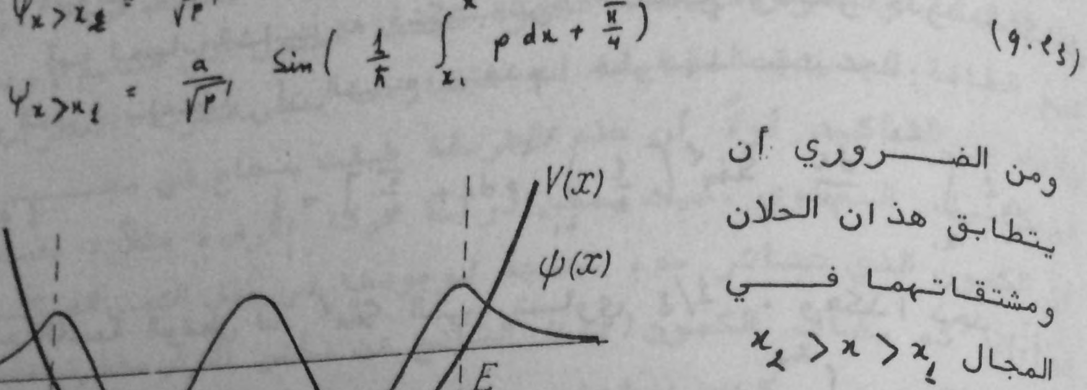
ويمكن البرهان أن التابع التالي سيكون استمراراً تحليلياً للتابع الأول. أما الزوج الثاني فهو :

$$\left.\begin{aligned} \psi_{x<x_0} &= \frac{b}{\sqrt{P}} \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_0} P\,dx + \frac{\pi}{4}\right) \\ \psi_{x>x_0} &= \frac{b}{\sqrt{|P|}}\, e^{\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{x}|P|dx} \end{aligned}\right\} \qquad (9.21)$$

حيث a ، b هي ثابتا التنظيم.

81 ـ تطبيق : دراسة جسيم في حفرة كمون بطريقة .W.K.B

لنفرض حفرة كمون نرسمها اختيارياً على الشكل (9.2)، ولنحسب التابع الموجي المنظم الذي يصف الجسيم في هذه الحفرة بطريقة .W.K.B لنأخذ أولاً المجموعة الأولى من الحلول ضمن الحفرة :



$$\psi_{x>x_2} = \frac{a'}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right) \qquad (9.22)$$

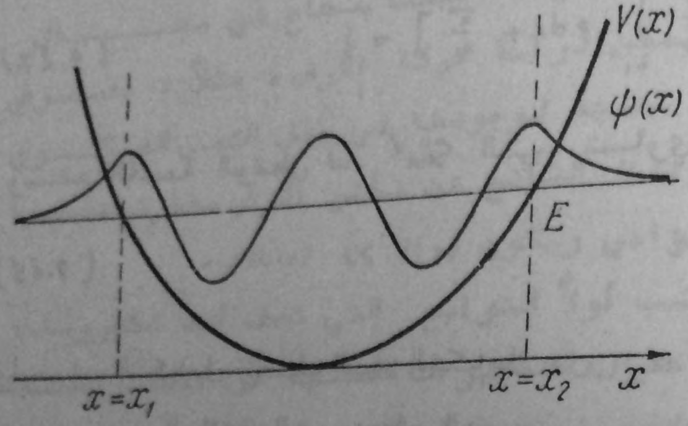
$$\psi_{x>x_1} = \frac{a}{\sqrt{p}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right) \qquad (9.23)$$

ومن الضـــروري أن يتطابق هذان الحلان ومشتقاتهما فـــي المجال



$x_2 > x > x_1$

أي :



شكل (9.2)

$$\left.\begin{aligned} a' \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right) - a \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right) = 0 \\ a' \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right) + a \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right) = 0 \end{aligned}\right\} \qquad (9.24)$$

وحتى يكون لهما حل غير الصفر بالنسبة للمجهولين a و a' يجب أن ينعدم معين الأمثال ومنه نجد :

$$\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p\,dx + \frac{\pi}{2}\right) = 0 \qquad (9.25)$$

وهذا يتحقق عندما :

$$\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} p\,dx + \frac{\pi}{2} = (n+1)\pi \;;\; n = 0, 1, \ldots$$

أو :

$$\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} p\,dx = (n+1)\pi - \frac{\pi}{2} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \Rightarrow$$

$$\oint p\,dx = 2\pi\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad (9.26)$$

فاذا عوضنا P بقيمتها بدلالة E و V ثم استكملنا بـ x فاننا

نجد E. وهي تشبه ما هو معروف في نظرية بور للذرة .

أما لحساب الثابت a فنكتب شرط التنظيم ونحصر حدود التكامل ضمن الحفرة باعتبار أن التابع ينعدم خارجها حيث نجد :

$$a^2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{p} \sin^2\left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p\,dx + \frac{\pi}{4} \right] = 1 \qquad (9.27)$$

وسنضع القيمة الوسطى لـ $\sin^2$ التي تساوي $1/2$. وهكذا نجد :

$$\frac{1}{2} a^2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{p} = 1 \qquad (9.28)$$

ولحساب التكامل نضيف اليه التكامل من x_2 الى x_1 (دورة مغلقة) ونستفيد من العلاقة التي تعطي الدور :

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega} = 2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{v} = 2m \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{p}$$

ومنه نجد :

$$a = \sqrt{\frac{2\omega m}{\pi}} \qquad (9.29)$$

وبالتالي يكون التابع الموجي المنظم لجسيم في حفرة الكمون في التقريب .W. K. B :

$$\psi \simeq \sqrt{\frac{2\omega m}{\pi v}} \sin\left(\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p\,dx + \frac{\pi}{4} \right) \qquad (9.30)$$

ب – نظرية الاضطراب : (Perturbation theory)

كثيراً ما يصعب ايجاد الحل الدقيق لمعادلة شرودنغر (حساب التابع ψ وتعيين قيم الطاقة E_n) . الا أنه من الممكن في كثير من الأحيان ايجاد حل تقريبي يفي بالغرض ويصف الظاهرة الفيزيائية جيداً .

لتكن جملة كوانتية تتأثر بكمون V وهي موصوفة بتابع ψ معروف تماماً . فاذا تأثرت بكمون اضافي طفيف ΔV بحيث يكون

$V << \Psi$، فلا بد من البحث عن تابع آخر Ψ ، يختلف عن Ψ ،لوصف هذه الجملة .وسندرس في هذه الفقرة كيفية الحصول على التابع Ψ وحساب قيم الطاقة الجديدة المقابلة له طبقا لما يسمى نظرية الاضطراب .
ولابد من التأكيد أولاً أن هذه الطريقة طبقت بنجاح في مجـــال الميكانيك السماوي ،حيث يمكن دراسة حركة الأرض، مثلاً ، بفـرض أن الكمون الذي تتأثر به ، نتيجة لوجودها في حقل الشمس المركـــزي هو $V(r)$ ثم يضاف الكمون $u(r)$ الناتج عن تأثر الأرض بجارتيهـــا الزهرة والمريخ ، كحد اضطرابي ويكون $V(r) >> u(r)$.

أما في ميكانيك الكم فنحسب أولاً التوابع التي تصف أحد الكترونات ذرة ما وصفاً دقيقاً ، باهمال التأثيرات الناتجة عن الالكترونـــات الأخرى ، ثم نأخذ بعين الاعتبار هذه التأثيرات في مرحلة ثانيـــة كحد اضطرابي .

82 ـ المعادلات العامة لنظرية الاضطراب غير المتعلقة بالزمن :

ليكن $\hat{H}$ موءثر هاملتون للجملة ولنفرض أنه يتألف من ثلاثة حدود من الشكل :

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}^{\circ} + \hat{V}' = \hat{H}^{\circ} + \hat{V}' \quad (9.31)$$

حيث $\hat{V}^{\circ} >> \hat{V}'$ و $\hat{V}^{\circ}$ هو الكمون الرئيسي . وسنفرض أن الحل العام Ψ° لمعادلة شرودنغر التالية :

$$(E^{\circ} - \hat{H}^{\circ})\,\Psi^{\circ} = 0 \quad (9.32a)$$

معروف تماماً . واعتماداً على هذا الحل وعلى قيم الطاقة المقابلـة يطلب ايجاد حل معادلة شرودنغر التالية، (بعد اضافة الحـــد الاضطرابي)،

$$(E - \hat{H}^{\circ} - \hat{V}')\,\Psi = 0 \quad (9.32b)$$

ومن ثم حساب Ψ و E . ولهذا نبحث عن Ψ و E بالشكـل :

$$\Psi = \Psi^0 + \Psi' + \Psi'' + \dots \qquad (9.33)$$

$$E = E^0 + E' + E'' + \dots \qquad (9.34)$$

حيث Ψ' و E' لامتناهيان في الصغر من المرتبة الأولى بالنسبة لـ Ψ^0 و E^0 ، أما Ψ'' و E'' فهما لامتناهيان في الصغر من المرتبة الثانية ، وهكذا ... أي أن : $E'' \ll E' \ll E^0$.

لنبدل (9.33) و (9.34) في معادلة شرودنغر (9.32b) مقتصرين على التقريب من المرتبة الأولى فنحصل على المعادلة :

$$(E^0 + E' - \hat{H}^0 - \hat{V}')(\Psi^0 + \Psi') = 0$$

أو :

$$(E^0 - \hat{H}^0)\Psi^0 + (E' - \hat{V}')\Psi^0 + (E^0 - \hat{H}^0)\Psi' + (E' - \hat{V}')\Psi' = 0$$

وباهمال الحد الأخير، باعتباره لامتناهياً في المرتبة الثانية، أمام الحدود الباقية وملاحظة أن $(E^0 - \hat{H}^0)\Psi^0 = 0$ ،حيث تأخذ E^0 القيم $E_1^0, E_2^0, \dots, E_n^0$ المقابلة للتوابع الخاصة $\Psi_1^0, \Psi_2^0, \dots, \Psi_n^0$ والتي ترتبط فيما بينها بالمعادلة :

$$(E_{n'}^0 - \hat{H}^0)\Psi_{n'}^0 = 0 \qquad (9.36)$$

وعندئذ نجد أن التابع Ψ' يحقق المعادلة التالية :

$$(E^0 - \hat{H})\Psi' = -(E' - \hat{V}')\Psi^0 \qquad (9.37a)$$

وهي معادلة صحيحة دوماً وتنطبق على كل الحالات الكوانتية للجملة المدروسة ، واذا فرضنا أن هذه الجملة تقع في الحالة الكوانتية n غير المضطربة فهي بالتالي توصف بالتابع Ψ_n^0 المقابل للطاقة E_n^0 أي أن : $\Psi^0 = \Psi_n^0 \ , \ E^0 = E_n^0 \ , \ E' = E_n' \ , \ \Psi' = \Psi_n'$

وهكذا نحصل من (9.37a) على المعادلة :

$$(E_n^0 - \hat{H}^0)\Psi_n' = -(E_n' - \hat{V}')\Psi_n^0 \qquad (9.37b)$$

وسنبحث عن الحل Ψ_n' كمجموع توابع من الشكل Ψ_n^0، مع العلم أن هذه التوابع ، باعتبارها توابع خاصة للمؤثر $\hat{H}^0$ ،هي متعامدة ومنظمة

وتحقق الشرط (3.44) ، وهكذا نكتب ψ'_n بالشكل :

$$\psi'_n = \sum_{n'} C_{n'} \psi^{\circ}_{n'} \qquad (9.38)$$

وبالتبديل في (9.37b) نجد المعادلة :

$$\sum_{n'} C_{n'} (E^{\circ}_n - \hat{H}^{\circ}) \psi^{\circ}_{n'} = -(E'_n - \hat{V}') \psi^{\circ}_n \qquad (9.39)$$

وبالاستفادة من (9.36) نضع المعادلة السابقة بالشكل :

$$\sum_{n'} C_{n'} (E^{\circ}_n - E^{\circ}_{n'}) \psi^{\circ}_{n'} = -(E'_n - \hat{V}') \psi^{\circ}_n \qquad (9.40)$$

ومن هذه المعادلة سنعين E'_n و ψ'_n . ولكن الأمر يختلف حسب ما تكون سويات الطاقة منطبقة أو غير منطبقة ولذلك سنميز كلاً من هاتين الحالتين على حده .

اولا ـ الطيف غير منطبق :

يقابل ، في هذه الحالة ، كل قيمة خاصة واحدة لـ E°_n تابع وحيد ψ°_n ، وعندئذ ، لحساب E'_n ، نضرب طرفي المعادلة (9.40) من اليسار $\psi^{\circ *}_n$ ونستكمل في كل نقط الفراغ فنجد :

$$\sum_{n'} C_{n'} (E^{\circ}_n - E^{\circ}_{n'}) \delta_{nn'} = -E'_n + \int \psi^{\circ *}_n \hat{V}' \psi^{\circ}_n \, dv \qquad (9.41)$$

ومن الواضح أن الطرف الأيسر يساوي الصفر دوماً : فعندما $n = n'$ يكون $E^{\circ}_n = E^{\circ}_{n'}$ وعندما $n \neq n'$ يكون $\delta_{nn'} = 0$ ومنه نحسب عندئذ E'_n حيث نجد :

$$E'_n = V'_{nn} = \langle n | \hat{V}' | n \rangle = \int \psi^{\circ *}_n \hat{V}' \psi^{\circ}_n \, dv \qquad (9.42)$$

وهي القيمة الوسطى للكمون الاضافي $\hat{V}'$ في الحالة n .

أما لحساب التابع ψ'_n فلا بد من حساب العوامل $C_{n'}$ أولا ولهذا نضع المعادلة (9.40) بالشكل :

$$\sum_{n''} C_{n''} \left(E^0_n - E^0_{n''} \right) \psi^0_{n''} = -\left(E'_n - \hat{V}'\right) \psi^0_n \qquad (9.43)$$

ثم نضرب الطرفين من اليسار بـ $\psi^{0*}_{n'}$ ونستكمل في كافة نقط الفراغ، (مع العلم أن الجمع بـ n'' يحوي كل الحدود ماعدا الحد $n''=n$ التي رأيناها سابقاً)، وعندئذ يكون :

$$\sum_{n''} C_{n''} \int \psi^{0*}_{n'} \left(E^0_n - E^0_{n''} \right) \psi^0_{n''}\, dV = \int \psi^{0*}_{n'} \left(E'_n - \hat{V}'\right) \psi^0_n\, dV$$

أو بالشكل :

$$C_{n'} \left(E^0_n - E^0_{n'} \right) = V'_{n'n} = \int \psi^{0*}_{n'}\, \hat{V}'\, \psi^0_n\, dV \qquad (9.44)$$

ومنه :

$$C_{n'} = \frac{V'_{n'n}}{E^0_n - E^0_{n'}} \qquad (9.45)$$

وبالتعويض في (9.38) نجد عبارة التابع ψ'_n التالية :

$$\psi'_n = C_n \psi^0_n + \sum_{n'}{}' C_{n'} \psi^0_{n'} \qquad (9.46)$$

حيث تعني الاشارة ($'$) على المجموع السابق أن هذا المجموع يؤخذ بكل الحدود ماعدا الحد $n'=n$ ، كما اشترطنا أولاً عند استنتاج (9.45)، ويمكن الآن حساب التابع ψ'_n بالتبديل في (9.33) حيث نجد :

$$\psi_n = \psi^0_n + \psi'_n = \psi^0_n + C_n \psi^0_n + \sum_{n'}{}' C_{n'} \psi^0_{n'} = C^0_n \psi^0_n + \sum_{n'}{}' C_{n'} \psi^0_{n'} \qquad (9.47)$$

وذلك بفرض $C^0_n = 1 + C_n$. ولكي ننتهي من هذه المسألة يجب حساب C^0_n ومن ثم حساب C_n ، ولهذا نستفيد من شرط التنظيم للتابع ψ_n الذي يصف الجملة المضطربة أي أن :

$$\int \Psi_n^* \Psi_n \, dV = 1 \qquad (9.48)$$

بتبديل التابع Ψ_n بقيمته من (9.47) نحصل على العلاقة، (بعد اهمال الحدود من المرتبة الثانية في الصغر) :

$$|C_n^\circ|^2 \int \Psi_n^{\circ *} \Psi_n^\circ dV + \sum_{n'}{}' \left\{ C_n^{\circ *} C_{n'} \int \Psi_n^{\circ *} \Psi_{n'}^\circ dV + C_{n'}^* C_n^\circ \int \Psi_{n'}^{\circ *} \Psi_{n'}^\circ dV \right\} = 1$$

ومنه نستنتج $C_n^\circ = 1$ وبالتالي $C_n = 0$.

وهكذا نستطيع وضع التابع Ψ_n الذي يصف الحالة المضطربة في التقريب الأول بالشكل :

$$\Psi_n = \Psi_n^\circ + \Psi_n' = \Psi_n^\circ + \sum_{n'}{}' \frac{V'_{n'n}}{E_n^\circ - E_{n'}^\circ} \Psi_{n'} \qquad (9.49)$$

ثانيا - الطيف منطبق :

يكون طيف موءثر ما منطبقاً عندما يقابل قيمة خاصة واحدة عدة توابع خاصة وفي حالتنا هذه يقابل القيمة E_n° عدداً من التوابع هي : $\Psi_{n_1}^\circ , \Psi_{n_2}^\circ , \ldots , \Psi_{n_j}^\circ$ حيث j عدد هذه التوابع (رتبة الانطباق) . وعندئذ يكون المقدار :

$$\Psi_n^\circ = \sum C_i^\circ \Psi_{n_i}^\circ \qquad (9.50)$$

هو حل أيضا لمعادلة شرودنغر غير المضطربة (9.52a) . واذا حدث اضطراب معبر عنه بالكمون V' فان كل شيء يتغير ولايصبح Ψ_n° حلا للمعادلة الجديدة . وعندئذ اذا ضربنا طرفي المعادلة (9.57b) ب $\Psi_{n_i}^{\circ *}$ ثم استكملنا في كل الفراغ فاننا نحصل على المعادلة :

$$\int \Psi_{n_i}^{\circ *} (E_n^\circ - \hat{H}^\circ) \Psi_n' \, dV = - \int \Psi_{n_i}^{\circ *} (E_n' - \hat{V}') \Psi_n^\circ \, dV \qquad (9.51)$$

واذا أخذنا بعين الاعتبار هرميتية الموءثر $\hat{H}^\circ$ فيمكن وضع المعادلة السابقة بالشكل:

$$\int \Psi_n' \left(E^\circ - \hat{H}^\circ \right) \Psi_{ni}^{\circ *} \, dV = - \int \Psi_{ni}^{\circ *} \left(E_n' - \hat{V}' \right) \Psi_n^\circ \, dV \qquad (9.52)$$

ولكن Ψ_{ni}° هو حل لمعادلة شرودنغر بدون الاضطراب وبالتالي يحققها، أي ان الطرف الأيسر يساوي الصفر وبالتالي يكون، (بعد التعبير عن Ψ_n° بقيمتها طبقا لـ 9.50) :

$$\int \Psi_{ni}^{\circ *} \left(E_n' - \hat{V}' \right) \sum c_i^\circ \Psi_{ni'}^\circ \, dv = 0 \qquad (9.53)$$

وبما أن التوابع Ψ_{ni}° متعامدة ومنظمة فيمكن الحصول من (9.53) على المعادلة الأساسية التالية :

$$c_i^\circ \left(E_n' - V_{ii}' \right) = \sum_{i'}' c_{i'}^\circ V_{ii'}' \qquad (9.54)$$

حيث يعطى المقداران V_{ii}' و $V_{ii'}'$ بالعلاقتين:

$$V_{ii}' = \int \Psi_{ni}^{\circ *} V' \Psi_{ni}^\circ \, dV \quad , \quad V_{ii'}' = \int \Psi_{ni}^{\circ *} V' \Psi_{ni}^\circ \, dV \qquad (9.55)$$

تؤلف العلاقات (9.54) حيث $(i = 1, 2, \ldots, j)$ مجموعة معادلات جبرية خطية عددها j كافية لحساب العوامل c_i° ، وهي توضع بالشكل :

$$\left.\begin{array}{lllll} c_1^\circ \left(E_n' - V_{11}' \right) & - c_2^\circ V_{12}' & \ldots & - c_j^\circ V_{1j}' & = 0 \\ - c_1^\circ V_{21}' & c_2^\circ \left(E_n' - V_{22}'' \right) & \ldots & + c_j^\circ V_{2j}' & = 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ - c_1^\circ V_{j1}' & \ldots & \ldots & c_j^\circ \left(E_n' - V_{jj}'' \right) & = 0 \end{array}\right\} \qquad (9.56)$$

وحتى يكون لهذه المعادلات حلا غير الصفر بالنسبة c_i° ينبغي أن ينعدم معين الأمثال التالي :

$$\begin{vmatrix} E_n' - V_{11}' & - V_{12}' & \ldots & - V_{1j}' \\ - V_{21}' & E_n' - V_{22}' & \ldots & - V_{2j}' \\ \vdots & \vdots & & \\ - V_{j1}' & \ldots & \ldots & E_n' - V_{jj}' \end{vmatrix} = 0 \qquad (9.57)$$

وهي عبارة عن معادلة جبرية من المرتبة g بالنسبة الى E'_n بحلها نحصل على g قيمة للطاقة. وبالتالي فان الانطباق يمكن أن يزول كلياً أو جزئياً عند تطبيق الكمون V'، وذلك تبعاً لاختلاف قيم الطاقة E'_n الناتجة من حل المعادلة السابقة (9.57).

83 - نظرية الاضطراب اللامستقرة (المتعلقة بالزمن):

من المعلوم أن حل معادلة شرودنغر غير المستقرة التالية:

$$\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}^{\circ}\right)\Psi^{\circ}(t)=0 \qquad (9.58)$$

يعطى بالعلاقة:

$$\Psi^{\circ}(t)=\sum_n C_n\, e^{\frac{i}{\hbar}Et}\,\Psi_n(x) \qquad (9.59)$$

حيث يمثل C_n طويلة احتمال وجود الجسيم في الحالة E_n، وعند حدوث اضطراب يتغير مؤثر هاملتون بمقدار $\hat{V}'$ وتصبح المعادلة:

$$\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}^{\circ}-\hat{V}'\right)\Psi(t)=0 \qquad (9.60)$$

ويطلب الآن معرفة الحل $\Psi(t)$ وحساب القيم الخاصة الجديدة. ولهذا نتبع الطريقة نفسها التي تستخدم في المعادلات التفاضلية فنفرض أن C في (9.59) يتعلق بالزمن ونبدل (9.59) في (9.60) فنجد بالاعتماد على (9.58) أن:

$$-\frac{\hbar}{i}\sum_{n''}\dot{C}_{n''}\Psi_{n''}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n''}t}=\sum_{n''}\hat{V}'(t)\,C_{n''}\,\Psi_{n''}\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n''}t} \qquad (9.61)$$

لنضرب الطرفين بـ $\Psi^*_{n'}\,e^{\frac{i}{\hbar}E_{n'}t}$ ونستكمل في كل نقط الفراغ فنجد:

$$\frac{\hbar}{i}\int\Psi^*_{n'}e^{\frac{i}{\hbar}E_{n'}t}\sum_{n''}\dot{C}_{n''}\Psi_{n''}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n''}t}\,dV=\int\sum_{n''}\Psi^*_{n'}e^{\frac{i}{\hbar}E_{n'}t}\,\hat{V}'(t)\,C_{n''}\Psi_{n''}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n''}t}\,dV \qquad (9.62)$$

ومنه نجد المعادلة الأساسية التالية لحساب $\dot{C}_{n'}$:

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{C}_{n'}=\sum_{n''}C_{n''}\,V'_{n'n''}\,e^{i\omega_{n'n''}t} \qquad (9.63)$$

حيـــث :

$$\omega_{n'n''} = \frac{E_{n'} - E_{n''}}{\hbar} \qquad (9.64)$$

وليس من الممكن حل هذه المعادلة بشكل دقيق ولهذا نستخدم تقريب نظرية الاضطراب فنفرض الحل من الشكل :

$$C_{n'} = C^{0}_{n'} + C'_{n'} + C''_{n'} + \dots \qquad (9.65)$$

حيث $C^{0}_{n'}$ لايحوي V' ، $C'_{n'}$ يحوي V' من المرتبة الأولى وهكذا ...
نبدل (9.65) في (9.63) فنحصل على المعادلة :

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{C}_{n'} = -\frac{\hbar}{i}(\dot{C}^{0}_{n'} + \dot{C}'_{n'} + \dot{C}''_{n'} + \dots) = \sum_{n''} C_{n''} V'_{n'n''} e^{i\omega_{n'n''}t} \qquad (9.66)$$

ومنه نجد :

(التقريب الصفري) (9.67)

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{C}^{0}_{n'} = 0$$

(التقريب الاول) (9.68)

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{C}'_{n'} = \sum_{n''} C^{0}_{n''} V'_{n'n''}$$

... وهكذا نكتب التقريبات المتتالية .
ويبدو من (9.67) أن $C^{0}_{n'}$ لايتعلق بالزمن أي أن :

$$C^{0}_{n'} = \text{Const.} \qquad (9.69)$$

وبما أن $C^{0}_{n'}$ ثابتة فيمكن أن تؤخذ هذه القيمة قبل بداية الاضطراب . فاذا فرضنا أن الجسيم (الكترون مثلا) كان موجوداً في البدء في الحالة n وبالتالي فان طويلة الاحتمال هي $C^{0}_{n''} = \delta_{nn''}$ وعندئذ اذا بدلنا في التقريب الأول (9.69) فاننا نحصل على $\dot{C}_{n'}(t)$ التالية :

$$\dot{C}'_{n'}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_{n''}\delta_{nn''} e^{i\omega_{n'n''}t} V'_{n'n''}(t) = -\frac{i}{\hbar} e^{i\omega_{n'n}t} V'_{n'n}(t)$$

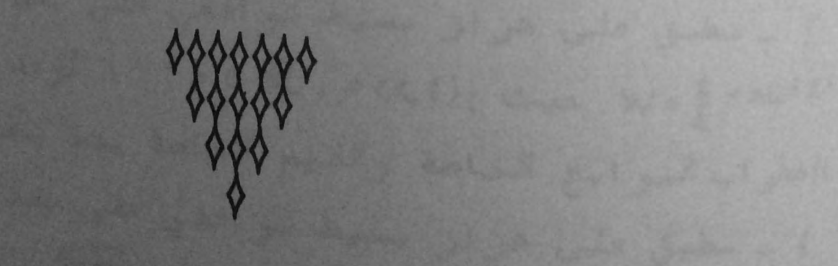
وبالاستكمال نحصل على :

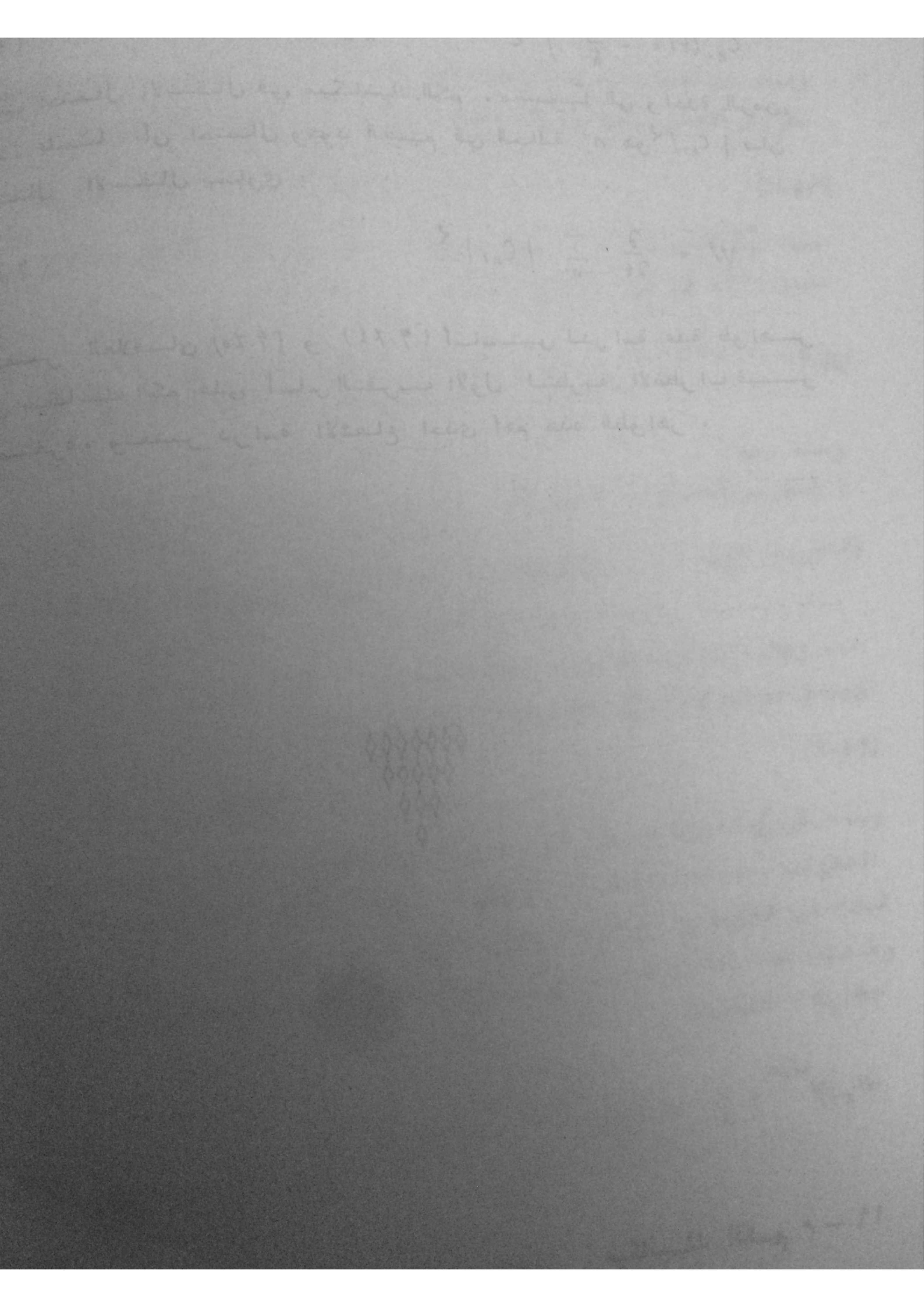
$$C'_{n'}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int e^{i\omega_{n'n''}t}\, V'_{n'n}(t)\, dt \qquad (9.70)$$

يحسب احتمال الانتقال في ميكانيك الكم ، منسوباً الى واحدة الزمن، فاذا علمنا أن احتمال وجود الجسيم في الحالة n' هو $|C_{n'}|^2$ فان احتمال الانتقال يساوي :

$$W = \frac{\partial}{\partial t}\sum_{n'} |C_{n'}|^2 \qquad (9.71)$$

وتعتبر العلاقتان (9.70) و (9.71) أساسيتين لدراسة عدة ظواهر في ميكانيك الكم على أساس التقريب الأول لنظرية الاضطراب غير المستقرة. وتعتبر دراسة الاشعاع احدى أهم هذه الظواهر .





مسائل الفصل التاسع

1 - يتحرك جسيم عديم السبين في حقل مركزي $V(r)$ بحيث تكون طاقته E_{nl} معلومة . استخدم نظرية الاضطراب في التقريب الأول لحساب التغير على الطاقة الذي يحدث نتيجة لوضع الجسيم في حقل مغناطيسي ضعيف $\vec{B}$ ، يتجه باتجاه المحور oz ، ناتج عن كمون شعاعي $\vec{A}$ نطلب حسابه أولاً .

2 - دوّار مستوي يتأثر بحقل كهربائي $\vec{\mathcal{E}}$ متجانس وضعيف ويتجه باتجاه المحور ox . احسب طبقاً لنظرية الاضطراب الطاقة الاضافية الناتجة عن تطبيق الحقل $\vec{\mathcal{E}}$ مع العلم أن هذا الدوّار يعتبر كشحنة كهربائية تتحرك على دائرة في المستوى xoy .

3 - احسب التصحيح اللازم اضافته الى الطاقة في المرتبة الثانية في الصغر (أي E''_{nl}) وذلك في الحالة العامة من نظرية الاضطراب .

4 - نطبق على هزاز بسيط توافقي على بعد واحد x الاضطراب $W=-q\mathcal{E}x$ ، أوجد باستخدام نظرية الاضطراب التوابع الخاصة والقيم الخاصة بعد تطبيق الاضطراب .

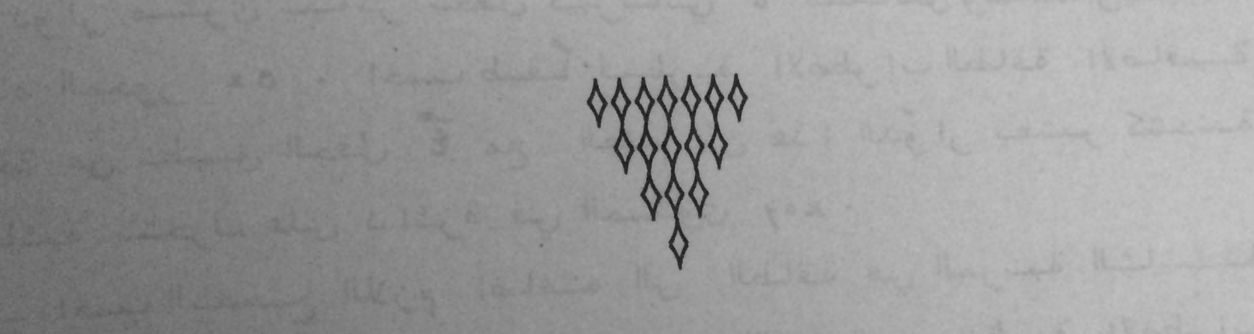
5 - نطبق على هزاز بسيط توافقي على بعد واحد x الاضطراب $W=\frac{1}{2}\rho m\omega^2 x^2$ حيث : $(\rho \in \mathbb{R}, \rho \ll 1)$ ، أوجد باستخدام نظرية الاضطراب التوابع الخاصة والقيم الخاصة بعد تطبيق الاضطراب .

6 - نطبق على هزاز بسيط توافقي على بعد واحد x الاضطراب $W=\sigma\hbar\omega X^4$ حيث $(X=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x, \sigma \in \mathbb{R}, \sigma \ll 1)$ ، أوجد باستخدام نظرية الاضطراب التوابع الخاصة والقيم الخاصة بعد تطبيق الاضطراب .
يسمى الهزاز بعد تطبيق الاضطراب الهزاز اللاتوافقي .

ملاحظة : يمكن استخدام هذا التمرين في حساب الاهتزازات اللاتوافقية لجزيئة ثنائية الذرة .

7 - نطبق على هزاز بسيط توافقي على بعد واحد x الاضطراب $W=\lambda x^4$ حيث $(\lambda \in \mathbb{R}, \lambda \ll 1)$ ، أوجد باستخدام نظرية الاضطراب

التوابع الخاصة والقيم الخاصة للهزاز بعد تطبيق الاضطراب . يسمى الهزاز بعد تطبيق الاضطراب الهزاز اللاتوافقي .



الفصل العاشر

مدخل الى ميكانيك الكم النسبي

84 ـ معادلة كلاين ـ غوردون (Equation de Klein-Gordon)

تطبق معادلة شرودنغر ، التي درسناها في الفصول السابقة من هذا الكتاب على الجسيمات التي تتحرك بسرع صغيرة بالمقارنة مع سرعة الضوء c . ومن الجدير بالذكر أن هذه المعادلة ليست لامتغيرة بالنسبة لتحويلات لورنتز : وهي شرط النسبية بضرورة أن يكون لكل $\vec{r}$ و t دور متناظر في المعادلة. حيث أن معادلة شرودنغر تربط المشتق الأول للزمن t بالمشتق الثاني للموضع $\vec{r}$.

سنحاول في هذا الفصل دراسة الجسيمات ذات السرع القريبة من سرعة الضوء بواسطة معادلتين : معادلة كلاين ـ غوردون ومعادلة ديراك . و لايجاد المعادلتين السابقتين سنتبع الخطوات نفسها التي قمنا بها لايجاد معادلة شرودنغر : أي أننا سنقوم بايجاد العلاقة التي تربط الطاقة الكلية للجملة المدروسة E بدفعها $\vec{P}$:

$$E = f(\vec{P}) \qquad (10.1)$$

ومن ثم نبدل E و $\vec{P}$ بموءثرات حسب التالي :

$$E \to i\hbar\, \partial/\partial t \qquad (10.2)$$

$$\vec{P} \to -i\hbar\, \vec{\nabla} \qquad (10.3)$$

وذلك بفرض أن الجملة مكوّنة من جسيم حر ، أما في حالة خضوع الجملة السابقة لحقل كهرطيسي موصوف بالكمونين : الشعاعي $\vec{A}$ والسلمي V فاننا نبدل E و $\vec{P}$ بالموءثرات :

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - qV \qquad (10.4)$$

$$\vec{P} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla} - q\vec{A} \qquad (10.5)$$

حيث q شحنة الجسيم .

سنقوم في هذه الفقرة بايجاد معادلة كلاين – غوردون وذلك انطلاقا من العلاقة التي تربط بين طاقة جسيم حر E وكتلته السكونيه m_0 ودفعه $\vec{P}$:

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + m_0^2 c^4} \qquad (10.6)$$

بتبديل كل من E و $\vec{P}$ في هذه العلاقة بموءثرات نواجه المشكلة التالية : كيف يوءثر الموءثر $\vec{P}$ الموجود تحت الجذر التربيعي على التوابع الموجية، وهذه المشكلة ناتجة عن لاوحدانية الجذر التربيعي. لتخطي هذه المشكلة نقوم بتربيع العلاقة (10.6) فنجد :

$$E^2 - c^2 p^2 - m_0^2 c^4 = 0 \qquad (10.7)$$

بالتبديل بالموءثرات (10.2) و (10.3) نجد المعادلة التالية :

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(\vec{r},t) + c^2 \hbar^2 \nabla^2 \Psi(\vec{r},t) - m_0^2 c^4 \Psi(\vec{r},t) = 0 \qquad (10.8)$$

وهي معادلة كلاين – غوردون بالنسبة لجسيم حر . بضرب طرفي هذه المعادلة بـ $1/\hbar^2 c^2$ والترتيب نجد :

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \Psi(\vec{r},t) - \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \Psi(\vec{r},t) = 0 \qquad (10.9)$$

ان المعادلة (10.9) هي معادلة تنسورية في الفضاء الزماني المكاني وبالتالي فهي لامتغيرة تحت تاثير تحويلات لورنتز . بفرض أن :

$$K = \frac{m_0 c}{\hbar} \qquad (10.10)$$

وبالانتباه الى أن موءثر دالمبير يعطى بالعلاقة :

$$\Box^2 = \nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \qquad (10.11)$$

يمكننا كتابة معادلة كلاين – غوردون (10.9) بالشكل :

$$(\Box^2 - K^2)\Psi(\vec{r},t) = 0 \qquad (10.12)$$

من الجدير بالذكر أن معادلة كلاين – غوردون (10.12) تقبل الأمواج المستوية حلولا لها :

$$\Psi(\vec{r},t) = e^{i(\vec{k}\vec{r}-wt)} \qquad (10.13)$$

حيث ترتبط w بـ K بالعلاقة :

$$\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2M_0} \qquad (10.14)$$

هذه الحلول هي عبارة عن توابع خاصة للموءثرين $\vec{P}$ و E تقابل القيم الخاصة $\hbar\vec{k}$ و $\hbar\omega$ على الترتيب . في الحقيقة بتعويض (10.13) في (10.12) فاننا نجد أن E و $\vec{P}$ يحققان العلاقة (10.1)

$$\hbar\omega = \pm\sqrt{c^2\hbar^2k^2 + m_0^2c^4} \qquad (10.15)$$

ونلاحظ أن للطاقة جذرين : موجباً وسالباً .

85 – معادلة الاستمرار :

تعطى معادلة الاستمرار بالعلاقة :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t) + \operatorname{div}\vec{J}(\vec{r},t) = 0 \qquad (10.16)$$

حيث $\rho(\vec{r},t)$ كثافة الشحنة و $\vec{J}(\vec{r},t)$ كثافة التيار . نستطيع الحصول على معادلة الاستمرار اعتباراً من معادلة كلاين – غوردون ، وذلك بضرب العلاقة (10.9) بـ $\Psi^*(\vec{r},t)$ من اليسار وبجمع الناتج الى المرافق العقدي المعادلة نفسها بعد ضربه بـ $-\Psi(\vec{r},t)$ من اليسار أيضاً :

$$\Psi^*\nabla^2\Psi - \Psi\nabla^2\Psi^* - \frac{1}{c^2}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} - \Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial t^2}\right) = 0 \qquad (10.17)$$

يمكن كتابة هذه المعادلة بشكل يشابه شكل المعادلة (10.16) :

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right) + \operatorname{div}\left(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right) = 0 \qquad (10.18)$$

وذلك بفرض أن :

$$\rho = \frac{i\hbar}{2m_0c^2}\left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\right) \quad (10.19)$$

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*\right) \quad (10.20)$$

نلاحظ أن المعادلة التي تعطي كثافة التيار النسبية (10.20)، مطابقة تماما للمعادلة اللانسبية ، وأن كثافة الشحنة النسبية (10.19) تتحول الى كثافة شحنة لانسبية عندما تكون $v \ll c$ ($E = m_0c^2$)، وفي حالة كون سويات الطاقة مستقرة أي :

$$\Psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r})\ e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (10.21)$$

وتأخذ بالتالي كثافة الشحنة الشكل :

$$\rho = \varphi^* \varphi \quad (10.22)$$

يجب الاشارة هنا الى أن المناقشة السابقة، التي اجريناها على كثافة الشحنة، صحيحة بشرط كون الطاقة موجبة فقط ، أما في حالة كونها سالبة فليس هناك من معنى لكثافة الشحنة .

86 ـ معادلة ديراك (Dirac Equation, Equation de Dirac)

حصلنا في الفقرة (84) على معادلة كلاين ـ غوردون ،وهي معادلة تصف الجسيمات ذات السبين المعدوم $S = 0$ ، بتربيع المعادلة (10.6) ومن ثم استبدال $\vec{P}$ و E بموءثرات .

من الجدير بالذكر أن هناك طريقة أخرى وهي طريقة ديراك ، وتقوم طريقة ديراك على فكرة أنه يجب أن تكون العلاقة، التي تربط الطاقة E بالدفع $\vec{P}$ و بالطاقة السكونية m_0c^2 ، علاقة خطية ،ولهذا فقد فرض ديراك أن :

$$E = \hat{\beta}\, m_0 c^2 + c\hat{\alpha}\vec{P} = \sqrt{m_0^2c^4 + P^2c^2} \quad (10.23)$$

حيث $\hat{\alpha}$ و $\hat{\beta}$ موءثرات لاتتبادل فيما بينها . ولكي تتحقق هذه العلاقة يجب أن تحقق العلاقة :

$$(\hat{\beta}+\hat{\alpha})^2 = \hat{\beta}^2 + \alpha\beta + \beta\alpha$$

$$m_0^2c^4 + (\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2)c^2 = \hat{\beta}^2 m_0^2 c^4 + m_0 c^3 \sum_k (\hat{\alpha}_k\hat{\beta} + \hat{\beta}\hat{\alpha}_k)\hat{P}_k + c^2 \sum_k \sum_l \hat{\alpha}_k \hat{\alpha}_l \hat{P}_k \hat{P}_l \quad (10.24)$$

حيث $(k, l = x, y, z)$ ، مطابقة في $\hat{P}_x$ و $\hat{P}_y$ و $\hat{P}_z$ و m_0 فنجد :

$$\hat{\alpha}_k^2 = \hat{\beta}^2 = 1 \quad (10.25a)$$

$$\hat{\alpha}_k\hat{\beta} + \hat{\beta}\hat{\alpha}_k = 0 \quad (10.25b)$$

$$\hat{\alpha}_k\hat{\alpha}_l + \hat{\alpha}_l\hat{\alpha}_k = 2\delta_{kl} \quad (10.25c)$$

يبرهن على أنه يمكن تمثيل الموءثرات $\hat{\alpha}$ و $\hat{\beta}$ بمصفوفات من المرتبة (4×4) وعلى أنه لايوجد مصفوفات أدنى من هذه المرتبة تحقق العلاقات (10.25) ، وهذا ما سنراه في الفقرة التالية، وهذا يقتضي بأن يمثل التابع الموجي Ψ ، الذي يحقق معادلة ديراك، بمصفوفة ذات عمود واحد (4×1) ، وهذا يقتضي أيضا بأن يكون للجسيم ، الموصوف بالتابع الموجي Ψ درجات حرّية داخلية موصوفة بـ $\hat{\alpha}$ و $\hat{\beta}$ ، بالاضافة لدرجات حرّيته الخارجية الموصوفة بـ $\vec{r}$ و $\vec{P}$.

بكتابة الطرف الأول من المعادلة (10.23) بالشكل :

$$\hat{E} - c\sum_k \hat{\alpha}_k \hat{P}_k - \hat{\beta} m_0 c^2 = 0 \; ; (k = x, y, z) \quad (10.26)$$

وباستبدال E و $\vec{P}$ بالموءثرات (10.2) و (10.3) نحصل على معادلة ديراك التي تصف جسيما حراً :

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c\sum_k \hat{\alpha}_k \nabla_k - \hat{\beta} m_0 c^2\right)\Psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (10.27)$$

تكتب هذه المعادلة بشكل يشابه معادلة شرودنغر :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) = \hat{H}_D \Psi(\vec{r}, t) \quad (10.28)$$

حيث $\hat{H}_D$ هو موءثر الهاملتوني في معادلة ديراك لجسيم حر :

$$\hat{H}_D = \hat{\beta} m_0 c^2 + c\hat{\alpha}\hat{\vec{P}} \quad (10.29)$$

ويعطى $\hat{H}_D$ في حالة كون الجسيم خاضعا لحقل كهرطيسي بالعلاقة :

$$\hat{H}_D = \hat{\beta} m_0 c^2 + c\,\hat{\vec{\alpha}}\left[\hat{\vec{P}} - q\hat{\vec{A}}(\vec{r})\right] + q\hat{V}(\vec{r}) \qquad (10.30)$$

من الجدير بالذكر أن معادلة ديراك تختلف عن معادلة شرودنغـر لكونها خطية بالنسبة للمشتقات المكانية .

87 - مصفوفات ديراك :

لاحظ ديراك أنه حتى يكون الهاملتوني $\hat{H}_D$ هرميتي يجب أن تكون المصفوفات $\hat{\vec{\alpha}}$ و $\hat{\beta}$ هرميتية، وهذا يقتضي تحقق ما يلي :

$$\hat{\alpha}_k = \hat{\alpha}_k^+ = (\hat{\tilde{\alpha}}_k)^* \quad : (k = x, y, z) \qquad (10.31a)$$

$$\hat{\beta} = \hat{\beta}^+ = (\hat{\tilde{\beta}})^* \qquad (10.31b)$$

حيث يرمز كل من $\hat{\tilde{\alpha}}_k$ و $\hat{\tilde{\beta}}$ لمنقولي المصفوفتين $\hat{\alpha}_k$ و $\hat{\beta}$ على الترتيب ، وهكذا :

$$\hat{\alpha}_k \hat{\alpha}_k^+ = 1 \quad : (k = x, y, z) \qquad (10.32a)$$

$$\hat{\beta}\hat{\beta}^+ = 1 \qquad (10.32b)$$

مما يعني أن المصفوفات $\hat{\alpha}_k$ و $\hat{\beta}$ هي مصفوفات واحدية ، ولاحـظ أيضا من العلاقة $(10.25b)$ أن :

$$\left.\begin{aligned} \hat{\alpha}_k &= -\hat{\beta}\,\hat{\alpha}_k\,\hat{\beta}^+ \\ \hat{\beta} &= -\hat{\alpha}_k\,\hat{\beta}\,\hat{\alpha}_k^+ \end{aligned}\right\} : (k = x, y, z) \qquad (10.33)$$

وهذا يقتضي بأن أثر المصفوفات $\hat{\alpha}_k$ و $\hat{\beta}$ معدوم ،وهكذا فانهـا يجب أن تكون من أبعاد زوجية وأبسط شكل لها هو أن تمثل بمصفوفات من المرتبة (4×4) ، ولاحظ ديراك أيضا أن خواص المصفوفات $\hat{\vec{\alpha}}$ و $\hat{\beta}$ مطابقة تماماً لخواص مصفوفات باولي فاقترح ادخال المصفوفات $\hat{\rho}_k$ و $\hat{\sigma}'_k$ ، وهي مصفوفات من المرتبة (4×4)، لربط المصفوفات $\hat{\vec{\alpha}}$ و $\hat{\beta}$ بمصفوفات باولي ، ومعرفة بالشكل التالي :

$$
\left.
\begin{aligned}
\hat{\sigma}'_k &= \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_k & \hat{0}' \\ \hat{0}' & \hat{\sigma}_k \end{pmatrix} \; : (k = x, y, z) \\
\hat{\rho}_x &= \begin{pmatrix} \hat{0}' & \hat{I}' \\ \hat{I}' & \hat{0}' \end{pmatrix} \\
\hat{\rho}_y &= \begin{pmatrix} \hat{0}' & -i\hat{I}' \\ i\hat{I}' & \hat{0}' \end{pmatrix} \\
\hat{\rho}_z &= \begin{pmatrix} \hat{I}' & \hat{0}' \\ \hat{0}' & -\hat{I}' \end{pmatrix}
\end{aligned}
\right\} \qquad (10.34)
$$

حيث $\hat{\sigma}_k$ تمثل مصفوفات باولي التالية :

$$
\left.
\begin{aligned}
\hat{\sigma}_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
\hat{\sigma}_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\
\hat{\sigma}_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
\right\} \qquad (10.35)
$$

وحيث :

$$
\left.
\begin{aligned}
\hat{I}' &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
\hat{0}' &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}
\right\} \qquad (10.36)
$$

من الجدير بالذكر هنا أن خواص المصفوفات $\hat{\sigma}'_k$ و $\hat{\rho}_k$ ، التي اقترح ادخالها ديراك ، تطابق خواص مصفوفات باولي : فمربعاتها تساوي مصفوفة الواحدة :

$$
\hat{\sigma}'^2_k = \hat{\rho}^2_k = \hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (10.37)
$$

وأن المصفوفات $\hat{\sigma}'_k$ لاتقبل التبادل فيما بينها ، وكذلك المصفوفات $\hat{\rho}_k$:

$$
[\hat{\sigma}'_k , \hat{\sigma}'_l] = i\,\delta_{klm}\,\hat{\sigma}'_m \; : (k, l = x, y, z) \qquad (10.38)
$$

$$
[\hat{\rho}_k , \hat{\rho}_l] = i\,\delta_{klm}\,\hat{\rho}_m \qquad (10.39)
$$

حيث أدخلنا الاصطلاح :

$$
\delta_{klm} = \begin{cases} 1 & \text{اذا كانت الأدلة مرتبة دورياً} \\ -1 & \text{اذا كانت الأدلة غير دورية} \\ 0 & \text{اذا تساوي دليلان او اكثر} \end{cases} \; : \; k \to l \to m \;(+) \qquad (10.40)
$$

أو بشكل آخر :

$$\hat{\sigma}'_k \hat{\sigma}'_\ell + \hat{\sigma}'_\ell \hat{\sigma}'_k = \hat{\rho}_k \hat{\rho}_\ell + \hat{\rho}_\ell \hat{\rho}_k = 2\delta_{k\ell} \qquad (10.41)$$

ويبرهن أيضا على أن المصفوفات $\hat{\sigma}'_k$ و $\hat{\rho}_k$ تقبل التبادل فيما بينها :

$$[\hat{\sigma}'_k , \hat{\rho}_{k'}] = 0 \quad ; (k, k' = x, y, z) \qquad (10.42)$$

اقترح ديراك أيضا أنه يجب أن يكون شكل المصفوفات $\hat{\alpha}$ و $\hat{\beta}$ كما يلي :

$$\hat{\alpha}_k = \hat{\rho}_x \hat{\sigma}'_k = \begin{pmatrix} \hat{0}' & \hat{\sigma}'_k \\ \hat{\sigma}'_k & \hat{0}' \end{pmatrix} \quad ; (k = x, y, z) \qquad (10.43a)$$

$$\hat{\beta} = \hat{\rho}_z = \begin{pmatrix} \hat{I}' & \hat{0}' \\ \hat{0}' & -\hat{I}' \end{pmatrix} \qquad (10.43b)$$

نلاحظ أن مصفوفات ديراك تحقق العلاقات (10.25) حيث :

$$\hat{\alpha}_k^2 = \hat{\rho}_x^2 \hat{\sigma}'^2_k = \hat{I} \qquad (10.44)$$

$$\hat{\beta}^2 = \hat{\rho}_z^2 = \hat{I} \qquad (10.45)$$

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_k \hat{\beta} + \hat{\beta} \hat{\alpha}_k &= \hat{\rho}_x \hat{\sigma}'_k \hat{\rho}_z + \hat{\rho}_z \hat{\rho}_x \hat{\sigma}'_k = \\ &= \hat{\rho}_x \hat{\rho}_z \hat{\sigma}'_k + \hat{\rho}_z \hat{\rho}_x \hat{\sigma}'_k = \\ &= (\hat{\rho}_x \hat{\rho}_z + \hat{\rho}_z \hat{\rho}_x) \hat{\sigma}'_k = 0 \end{aligned} \qquad (10.46)$$

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_k \hat{\alpha}_\ell + \hat{\alpha}_\ell \hat{\alpha}_k &= \hat{\rho}_x \hat{\sigma}'_k \hat{\rho}_x \hat{\sigma}'_\ell + \hat{\rho}_x \hat{\sigma}'_\ell \hat{\rho}_x \hat{\sigma}'_k = \\ &= \hat{\rho}_x^2 \hat{\sigma}'_k \hat{\sigma}'_\ell + \hat{\rho}_x^2 \hat{\sigma}'_\ell \hat{\sigma}'_k = \\ &= \hat{\rho}_x^2 (\hat{\sigma}'_k \hat{\sigma}'_\ell + \hat{\sigma}'_\ell \hat{\sigma}'_k) = 0 \end{aligned} \qquad (10.47)$$

يعطى الشكل المفصّل لمصفوفات ديراك على النحو التالي :

$$\hat{\alpha}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (10.48)$$

$$\hat{\alpha}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (10.49)$$

$$\hat{\alpha}_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (10.50)$$

$$\hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (10.51)$$

88 - كثافتا الشحنات والتيار :

بما أن مرتبة المصفوفات $\hat{\alpha}$ و $\hat{\beta}$ هي (4×4) فان التابع الموجي الذي يحقق معادلة ديراك (10.27) هو عبارة عن مصفوفة من عمود واحد (4×1) ليكن :

$$\Psi(\vec{r},t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\vec{r},t) \\ \Psi_2(\vec{r},t) \\ \Psi_3(\vec{r},t) \\ \Psi_4(\vec{r},t) \end{pmatrix} \qquad (10.52)$$

فيكون مرافقه الهرميتي $\Psi^+(\vec{r},t)$ عبارة عن مصفوفة من سطر واحد (1×4) :

$$\Psi^{+}(\vec{r},t) = (\ \Psi_1(\vec{r},t)\ \Psi_2(\vec{r},t)\ \Psi_3(\vec{r},t)\ \Psi_4(\vec{r},t)) \qquad (10.53)$$

بجمع معادلة ديراك (10.7) بعد ضربها من اليسار بـ $\Psi^{+}(\vec{r},t)$ الى مرافقها العقدي بعد ضربها بـ $\Psi(\vec{r},t)$ ـ نحصل على :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^{+}\Psi) + \mathrm{div}\,(c\Psi^{+}\hat{\alpha}\Psi) \qquad (10.54)$$

وهي معادلة الاستمرار نفسها (10.16) بفرض أن :

$$\rho(\vec{r},t) = \Psi^{+}(\vec{r},t)\,\Psi(\vec{r},t) \qquad (10.55)$$

$$\vec{J}(\vec{r},t) = c\,\Psi^{+}(\vec{r},t)\,\hat{\alpha}\,\Psi(\vec{r},t) \qquad (10.56)$$

نلاحظ أن كثافة الشحنة (10.55) لها الشكل اللانسبي نفسه ، ويفسر وجود الحد $c\hat{\alpha}$ في العلاقة (10.56) على أنه موءثر السرعة.

89 – حلول معادلة ديراك لجسيم حر :

يقبل الموءثران $\hat{P}$ و $\hat{H}_D$ التبادل وذلك من أجل الالكترون الحر ، هكذا يمكن ايجاد قاعدة مشتركة من أشعتهما الخاصة : هذه القاعدة هي الأمواج المستوية. ونلاحظ أنه من أجل كل قيمة خاصة لـ $\hat{P}$ هناك قيمتان خاصتان لـ $\hat{H}_D$ وهما :

$$E_{\pm} = \pm\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} \qquad (10.57)$$

وهكذا فان طيف $\hat{H}_D$ مكوّن من طيفين مستمرين : الطيف الأول ويحوي قيم الطاقة التي تنتمي الى المجال $[m_0c^2, +\infty[$ الطيف الثاني يحوي قيم الطاقة التي تنتمي الى المجال $]-\infty, -m_0c^2]$.

سنحاول في هذه الفقرة ايجاد حلول معادلة ديراك للالكترون الحر آخذين بعين الاعتبار أنه يمكن أن يأخذ القيم الموجبة أو السالبة للطاقة ، يجب الاشارة هنا الى أن دراسة الطاقة السالبة أدت الى توقع وجود البوزيترون والى ادخال مفهوم جديد بالنسبة للجسيمات الأولية وهو مفهوم ضديد الجسيم . وفي النهاية ادخال احتمال تحوّل

الجسيمات الأولية .

بتعويض التابع الموجي (10.52) في معادلة ديراك (10.27) نحصل على :

$$i\hbar\begin{pmatrix}\partial\psi_1/\partial t\\ \partial\psi_2/\partial t\\ \partial\psi_3/\partial t\\ \partial\psi_4/\partial t\end{pmatrix} = i\hbar c\sum_k \hat{\alpha}_k\begin{pmatrix}\nabla_k\psi_1\\ \nabla_k\psi_2\\ \nabla_k\psi_3\\ \nabla_k\psi_4\end{pmatrix} + \hat{\beta} m_0 c^2\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} \qquad (10.58)$$

وهو شكل معادلة ديراك المصفوفي ، ونلاحظ أنها تكافىء جملة مكونة من أربع معادلات تفاضلية جزئية من المرتبة الأولى وهي خطية ومتجانسة في المركبات ψ_i . اذا استبدلنا $\hat{\alpha}_k$ و $\hat{\beta}$ حسب العلاقات (10.48-51) فان معادلة ديراك تأخذ الشكل التالي :

$$i\hbar\begin{pmatrix}\frac{\partial\psi_1}{\partial t}\\ \frac{\partial\psi_2}{\partial t}\\ \frac{\partial\psi_3}{\partial t}\\ \frac{\partial\psi_4}{\partial t}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-i\hbar c\left(\frac{\partial\psi_4}{\partial x} - i\frac{\partial\psi_4}{\partial y} + \frac{\partial\psi_3}{\partial z}\right) + m_0c^2\psi_1\\ -i\hbar c\left(\frac{\partial\psi_3}{\partial x} + i\frac{\partial\psi_3}{\partial y} - \frac{\partial\psi_4}{\partial z}\right) + m_0c^2\psi_2\\ -i\hbar c\left(\frac{\partial\psi_2}{\partial x} - i\frac{\partial\psi_2}{\partial y} + \frac{\partial\psi_1}{\partial z}\right) + m_0c^2\psi_3\\ -i\hbar c\left(\frac{\partial\psi_1}{\partial x} + i\frac{\partial\psi_1}{\partial y} - \frac{\partial\psi_2}{\partial z}\right) + m_0c^2\psi_4\end{pmatrix} \qquad (10.59)$$

تقبل معادلة ديراك حلولا على شكل أمواج مستوية مستقرة :

$$\Psi(\vec{r},t) = \begin{pmatrix}\psi_1(\vec{r},t)\\ \psi_2(\vec{r},t)\\ \psi_3(\vec{r},t)\\ \psi_4(\vec{r},t)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}b_1\\ b_2\\ b_3\\ b_4\end{pmatrix} e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} \qquad (10.60)$$

حيث b_1 و b_2 و b_3 و b_4 مستقلة عن الزمن و الاحداثيات ولكنها يمكن أن تكون متعلقة بالقيم الخاصة لـ $\hat{P}$ و $\hat{E}$. ان التوابع (10.60) هي توابع خاصة لمؤثرات الطاقة والدفع (10.2) و (10.3) مقابلة للقيم الخاصة $E = \hbar\omega$ و $\vec{P} = \hbar\vec{k}$ على الترتيب، بتعويض المعادلة (10.60) في (10.59) آخذين بعين الاعتبار أن $\frac{\partial}{\partial t} = \frac{E}{i\hbar}$ و $\nabla_k = \frac{P_k}{-i\hbar}$، فنجد :

$$E\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c(P_x b_4 - iP_y b_4 + P_z b_3) + m_0 c^2 b_1 \\ c(P_x b_3 + iP_y b_3 - P_z b_4) + m_0 c^2 b_2 \\ c(P_x b_2 - iP_y b_2 + P_z b_1) + m_0 c^2 b_3 \\ c(P_x b_1 + iP_y b_1 - P_z b_2) + m_0 c^2 b_4 \end{pmatrix} \quad (10.61)$$

تكتب المعادلة (10.61) على شكل جملة من أربع معادلات خطية متجانسة في b_1 و b_2 و b_3 و b_4 :

$$\begin{aligned} (E - m_0c^2)\, b_1 - cP_z\, b_3 - c(P_x - iP_y)\, b_4 &= 0 \\ (E - m_0c^2)\, b_2 + cP_z\, b_4 - c(P_x + iP_y)\, b_3 &= 0 \\ (E - m_0c^2)\, b_3 - cP_z\, b_1 - c(P_x - iP_y)\, b_2 &= 0 \\ (E - m_0c^2)\, b_4 + cP_z\, b_2 - c(P_x + iP_y)\, b_1 &= 0 \end{aligned} \quad (10.62)$$

يوجد لجملة المعادلات (10.62) حل غير تافه اذا وفقط اذا كان معين أمثالها معدوماً أي :

$$\begin{vmatrix} (E - m_0c^2) & 0 & -cP_z & -c(P_x - iP_y) \\ 0 & (E - m_0c^2) & -c(P_x + iP_y) & cP_z \\ -cP_z & -c(P_x - iP_y) & (E + m_0c^2) & 0 \\ -c(P_x + iP_y) & cP_z & 0 & (E + m_0c^2) \end{vmatrix} = 0 \quad (10.63)$$

$$[(E^2 - m_0^2 c^4) - c^2 p^2]^2 = 0 \qquad (10.64)$$

وهي بالعلاقة النسبية الكلاسيكية بين الطاقة والدفع ونلاحظ أن لهـا
جذرين : أحدهما موجب والآخر سالب .

$$E_{\pm} = \pm\sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} \qquad (10.65)$$

وهما الجذران اللذان تحدثنا عنهما في بداية هذه الفقرة . ومن
هنا تظهر أهمية معادلة ديراك و حلولها بشكل أمواج مستوية اذان
معادلة واحدة تعطينا مجموعتين من الحلول :

1 - مجموعة الحلول المقابلة للجذر الموجب $E_+ = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2 c^4}$

2 - مجموعة الحلول المقابلة للجذر السالب $E_- = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2 c^4}$

نستطيع الحصول على حلين مستقلين في b من أجل المجموعة الأولى
من الحلول المقابلة للجذر الموجب E_+ ، فاذا وضعنا في المعادلات

آ - $b_3 = 1$ و $b_4 = 0$ نجد :

$$b_1 = \frac{c P_z}{E_+ - m_0 c^2} \quad , \quad b_2 = \frac{c(P_x + i P_y)}{E_+ - m_0 c^2} \qquad (10.66)$$

ب - $b_3 = 0$ و $b_4 = 1$ نجد :

$$b_1 = \frac{c(P_x - i P_y)}{E_+ - m_0 c^2} \quad , \quad b_2 = \frac{-c P_z}{E_+ - m_0 c^2} \qquad (10.67)$$

وبالمقابل نستطيع أيضا الحصول على حلين مستقلين في b من أجل
المجموعة الثانية من الحلول المقابلة للجذر السالب E_- ، اذا وضعنا
في المعادلات :

آ - $b_1 = 1$ و $b_2 = 0$ نجد :

$$b_3 = \frac{c P_z}{E_- + m_0 c^2} \quad , \quad b_4 = \frac{i(P_x + i P_y)}{E_- + m_0 c^2} \qquad (10.68)$$

بفك هذا المعين نجد :

$$[(E^2 - m_0^2c^4) - c^2p^2]^2 = 0 \qquad (10.64)$$

وهي بالعلاقة النسبية الكلاسيكية بين الطاقة والدفع ونلاحظ أن لهـا جذرين : أحدهما موجب و الآخر سالب .

$$E_\pm = \pm\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} \qquad (10.65)$$

وهما الجذران اللذان تحدثنا عنهما في بداية هذه الفقرة . ومن هنا تظهر أهمية معادلة ديراك و حلولها بشكل أمواج مستوية اذان معادلة واحدة تعطينا مجموعتين من الحلول :

1 - مجموعة الحلول المقابلة للجذر الموجب $E_+ = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$

2 - مجموعة الحلول المقابلة للجذر السالب $E_- = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$

نستطيع الحصول على حلين مستقلين في b من أجل المجموعة الأولى من الحلول المقابلة للجذر الموجب E_+ ، فاذا وضعنا في المعادلات

آ - $b_3 = 1$ و $b_4 = 0$ نجد :

$$b_1 = \frac{cP_z}{E_+ - m_0c^2} \quad , \quad b_2 = \frac{c(P_x + iP_y)}{E_+ - m_0c^2} \qquad (10.66)$$

ب - $b_3 = 0$ و $b_4 = 1$ نجد :

$$b_1 = \frac{c(P_x - iP_y)}{E_+ - m_0c^2} \quad , \quad b_2 = \frac{-cP_z}{E_+ - m_0c^2} \qquad (10.67)$$

وبالمقابل نستطيع أيضا الحصول على حلين مستقلين في b من أجل المجموعة الثانية من الحلول المقابلة للجذر السالب E_- ، اذا وضعنا في المعادلات :

آ - $b_1 = 1$ و $b_2 = 0$ نجد:

$$b_3 = \frac{cP_z}{E_- + m_0c^2} \quad , \quad b_4 = \frac{i(P_x + iP_y)}{E_- + m_0c^2} \qquad (10.68)$$

ب ـ $b_1 = 0$ و $b_2 = 1$ نجد :

$$b_3 = \frac{c(p_x - ip_y)}{E_- + m_0c^2} \quad , \quad b_4 = \frac{-cp_z}{E_- + m_0c^2} \qquad (10.69)$$

وهكذا فان حلول معادلة ديراك وهي عبارة عن بي ـ سبينورات هي من أجل المجموعة الأولى من الحلول المستقلة المقابلة للطاقة الموجبة E_+ :

$$\upsilon_p^{I} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp_z}{E_+ - m_0c^2} \\ \frac{c(p_x + ip_y)}{E_+ - m_0c^2} \end{pmatrix} \qquad (10.70)$$

$$\upsilon_p^{II} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c(p_x - ip_y)}{E_+ - m_0c^2} \\ \frac{-cp_z}{E_+ - m_0c^2} \end{pmatrix} \qquad (10.71)$$

أما البي-سبينورات المرافقة للمجموعة الثانية من الحلول المستقلة المقابلة للطاقة السالبة E_- :

$$\upsilon_p^{III} = \begin{pmatrix} \frac{cp_z}{E_- + m_0c^2} \\ \frac{c(p_x + ip_y)}{E_- + m_0c^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad (10.72)$$

$$\psi_p^{IV} = \begin{pmatrix} \frac{c(p_x - i p_y)}{E_+ + m_0 c^2} \\ \frac{-c p_3}{E_- + m_0 c^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (10.73)$$

ونلخص خواص الحلول ψ_k من حيث الطاقة والدفع والقيمة الخاصة لـ S_3 (السبين) في الجدول التالي :

	ψ_1	ψ_2	ψ_3	ψ_4
الطاقة	$+E$	$+E$	$-E$	$-E$
الدفع	$+\vec{P}$	$+\vec{P}$	$-\vec{P}$	$-\vec{P}$
السبين	$+\hbar/2$	$-\hbar/2$	$+\hbar/2$	$-\hbar/2$

يجب الاشارة هنا الى أن البي ـ سبينورات تأخذ شكلاً بسيطاً عندما يكون $\vec{P}=0$ ، حيث نجد أن هاملتون ديراك يصبح $\hat{H}_D = \hat{\beta} m_0 c^2$ فمن أجل المجموعة الأولى من الحلول المقابلة للطاقة الموجبة $E_+ = m_0 c^2$ هي :

$$u_p^+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} , \quad u_p^- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (10.74)$$

وهي من أجل المجموعة الثانية الحلول المقابلة للطاقة السالبة $E_- = -m_0 c^2$:

$$v_p^+ = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} , \quad v_p^- = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (10.75)$$

90 ـ نظرية الثقوب :

ان قيم الخاصة التي يمكن أن تأخذ قيما سالبة حتى $-\infty$ $\hat{H}_D$ تسبب مشكلة في تفسير معناها الفيزيائي .

في الحقيقة ، يمكننا أن نعتبر الحالات المقابلات للقيم الخاصة السالبة عبارة عن حلول رياضية ليس لها معنى فيزيائي ، ونأخذ بعين الاعتبار الحالات المقابله للقيم الخاصة الموجبة فقط لوصف الالكترون. ولكن ومن حيث المبدأ ، لاشيء يمنع الكتروناً موجوداً في حالة طاقتها موجبة ، من الانتقال الى حالة طاقتها سالبة باصداره فوتوناً . وبما أن الجمل تميل في تطورها الى الاستقرار في حالة ذات طاقة دنيا ، فيجب أن تنتهي جميع الالكترونات الموجودة في الكون الى حالة طاقتها $-\infty$ في نهاية المطاف . ولهذا فقد وضع ديراك عام (1930) الفرضيات التالية :

آ - نفرض أن الجسيمات موجودة في حجم منته وهذا يقود الى أن طاقاتها مكممة .

ب - يمثل الفراغ الحالة الدنيا وتكون طاقته هي الطاقة الدنيا.

ج - تكون جميع الحالات ذات الطاقة السالبة مشغولة في الفراغ.

د - نستطيع فقط ملاحظة الاضطرابات التي تحدث في الفراغ، وهذه الاضطرابات لايمكن أن تكون الا على الشكلين التاليين :

1 - زيادة في الطاقة : وهي تمثل جسيما طاقته موجبة وله دفع $\vec{p}$ وسبين $\vec{S}$ وشحنة $e-$ " الالكترون مثلا " .

2 - نقص في الطاقة : وهي تمثل ثقب طاقته سالبة وله دفع $\vec{p}$ وسبين $\vec{S}$ وشحنة e والذي يظهر كدبيبة طاقة $-E>0$ ودفع $-\vec{p}$ وسبين $-\vec{S}$ " البوزيترون مثلا " .

ينتج من هذه الفرضيات : أنه لايسمح للالكترون ، الذي هو فيرميون، أن يشغل حالة طاقتها سالبة لأنها جميعاً مشغولة (مبدأ باولي)، وهذا ما يسمح للذرة بأن تبقى مستقرة ، الشكل(10.2)

سويات ذات طاقة موجبة

$+mc^2$

0

$-mc^2$

قطاع محظور

سويات ذات طاقة سالبة

شكل (10.2)

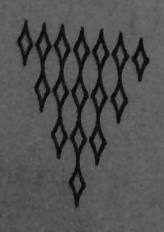
بما أن الالكترونات ذات الطاقة الموجبة لاتستطيع الانتقال الى حالات ذات طاقة سالبة بسبب انشغالها جميعاً ، فان العملية المعاكسة ممكنة الحدوث . فاذا امتص الكترون ، طاقته سالبة ، فوتونا طاقته أكبر أو تساوي $2m_0c^2$ فيمكنه الانتقال الى حالة ذات طاقة موجبة تاركاً وراءه ، في بحر الطاقات السالبة، ثقباً. تقابل هذه العملية ظاهرة خلق الزوج الكترون - بوزيترون ($e^- + e^+$)، حسب المعادلة :

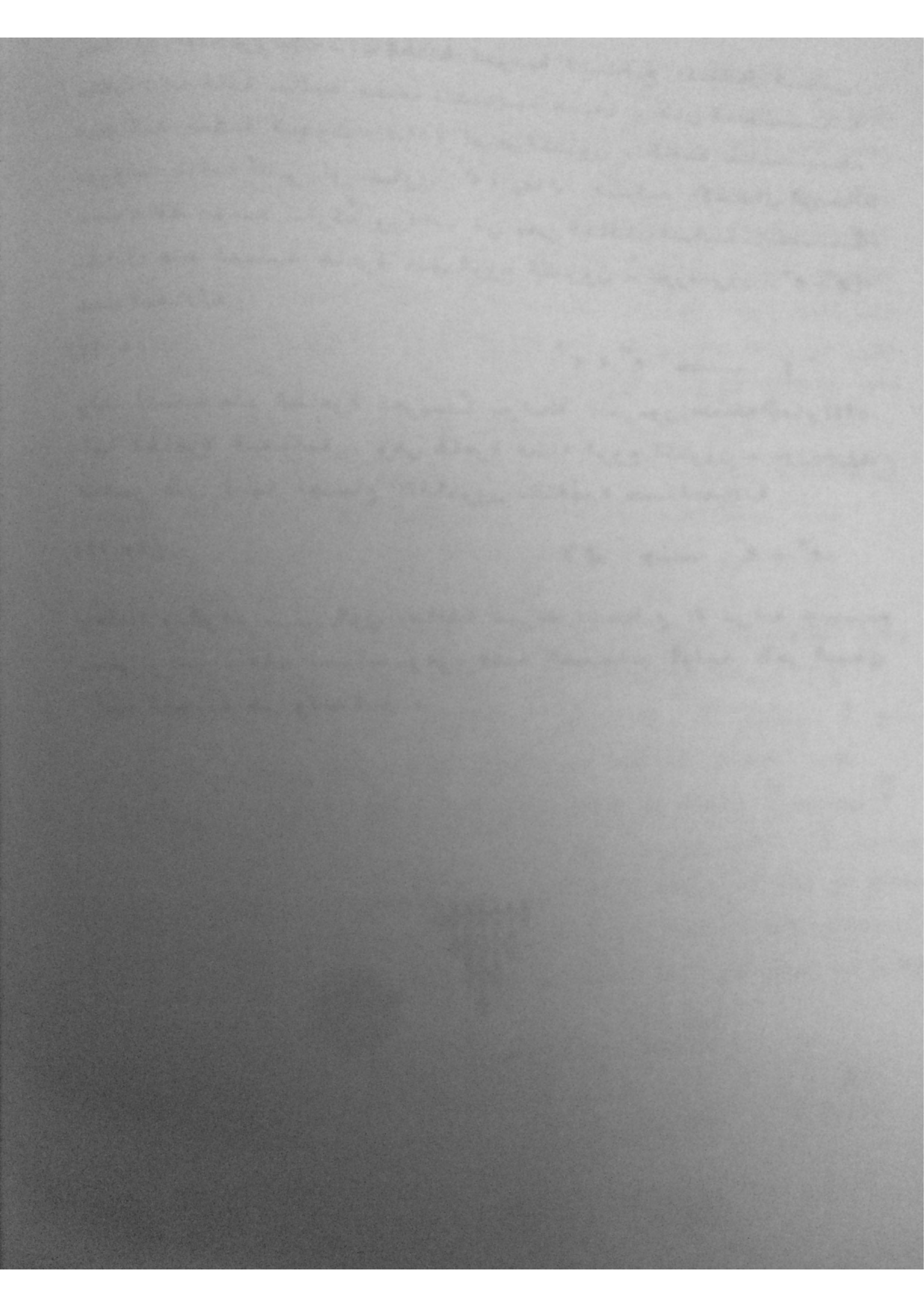
$$\gamma \longrightarrow e^- + e^+ \qquad (10.76)$$

وقد أثبتت هذه الظاهرة تجريبياً بواسطة اندرسون (Anderson) عام 1932. أما الظاهرة المعاكسة ، وهي ظاهرة فناء الزوج الكترون - بوزيترون ، فتفسر على أنها اجتماع الالكترون بالثقب ، حسب المعادلة :

$$e^+ + e^- \longrightarrow 2\gamma \qquad (10.77)$$

وهكذا وبالرغم من كون معادلة ديراك لاتستطيع الا دراسة جسيم نسبي واحد ، فقد تنبأت بوجود ضديد الجسيمات الأوليه الأمر الذي أثبته التجربة في وقت لاحق .





ملحق I

عوامل الجمع الشعاعي أو عوامل كليبش - غوردان

(Vector addition coefficients or Clebsh-Gordan coefficients)

كثيراً ما نحتاج عند دراسة مجموعة كوانتية مؤلفة من جسيم له عزم حركي $\hat{L}$ موصوف بالعدد الكمي l وسبين $\hat{S}$ موصوف بالعدد الكمي s ، نحتاج الى جمع هذين العزمين المداري والسبيني أي : $\hat{L}+\hat{S}$ ومعرفة التابع الخاص والقيم الخاصة الموافقة وقد تصادفنا هذه المشكلة أيضاً عند دراسة مجموعة كوانتية مؤلفة من جسيمين يمكن اهمال التأثير المتبادل بينهما (مثلا الكترونان على مدار خارجي حول النواة) . وهذا ما سندرسه بالتفصيل في هذه الفقرة الأخيرة .

ليكن $\hat{J}(1)$ ، $\hat{J}(2)$ العزمين المطلوب جمعهما وحساب القيم الخاصة والتوابع الخاصة للمؤثر المكون من مجموعهما ، وسنستخدم رموز ديراك فنكتب التابع الموجي $Y_l^m(\theta,\varphi)$ بالشكل $\langle\theta,\varphi|l,m\rangle$ أو $|l,m\rangle$.

لنلاحظ أولاً أن $\hat{J}(1)$ و $\hat{J}(2)$ يحققان علاقات التبادل التالية :

$$[\hat{J}_l(1),\ \hat{J}_k(2)] = 0 \quad ; (k,l = 1,2,3) \tag{1}$$

ولنفرض أن القيم الخاصة والتوابع الخاصة معروفة لكل منهما اي :

$$J^2(1) = \hbar^2 j_1(j_1+1)\ ,\quad J^2(2) = \hbar^2 j_2(j_2+1) \tag{2}$$

وكذلك :

$$J_z(1) = \hbar m_1\ ,\quad J_z(2) = \hbar m_2 \tag{3}$$

أي أن $|j_1,m_1\rangle$ هو التابع الخاص (متجه الحالة الكوانتية) للمؤثر $\hat{J}(1)$ و $|j_2,m_2\rangle$ هو التابع الخاص (متجه الحالة الكوانتية) للمؤثر $\hat{J}(2)$. ولنأخذ جداء المتجهين السابقين ونكتبه بالشكل :

$$|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle = |j_1,m_1\rangle\,|j_2,m_2\rangle \tag{4}$$

وبما أن m_1 تتحول من $-j_1$ الى $+j_1$ و m_2 من $-j_2$ الى $+j_2$ فانه يوجد $(2j_1+1)(2j_2+1)$ تابعاً خاصاً مختلفاً بـ m_1 أو m_2 .

نعرف الآن بموءثر مجموع عزمين حركيين $\hat{J}$ بالعلاقة :

$$\hat{J} = \hat{J}(1) + \hat{J}(2) \qquad (5)$$

ومن السهل أن نبرهن أن مركباته تحقق العلاقات التبادلية (1)، أما مسقط $\hat{J}$ على المحور oz فهو الموءثر $\hat{J}_z$ حيث :

$$\hat{J}_z = \hat{J}_z(1) + \hat{J}_z(2) \qquad (6)$$

فاذا أثرنا به على التابع (4) فاننا نجد :

$$\hat{J}_z|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle = \left(\hat{J}_z(1) + \hat{J}_z(2)\right)\left(|j_1,m_1\rangle|j_2,m_2\rangle\right) =$$

$$= \hbar(m_1+m_2)|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle = \hbar m|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle \qquad (7)$$

وهكذا فان التابع (4) هو تابع خاص للموءثر $\hat{J}_z$ أيضاً وقيمته الخاصة هي $\hbar m$. ولحساب ذلك للموءثر $\hat{J}^2$ نكتب :

$$\hat{J}^2 = \hat{J}^2(1) + \hat{J}^2(2) + 2\hat{J}(1)\hat{J}(2) \qquad (8)$$

وهو يتبادل مع كل من $\hat{J}^2(1)$ و $\hat{J}^2(2)$ ولهذا يمكن أن يكون له معهما قيمة خاصة وتابع خاص في الوقت نفسه . ومن الطبيعي أن لا تكون التوابع (4) توابعا خاصة للموءثر $\hat{J}^2$ وذلك بسبب وجود الحد $\hat{J}(1)\hat{J}(2)$ الذي يحوي على حالات مختلفة بـ m_1 و m_2 ، ولكن اذا اعتبرنا الخواص التبادلية المذكورة للموءثر $\hat{J}^2$ فيمكن أن نفرض أن توابعه الخاصة هي تركيب خطي من التوابع $|j_1,m_1\rangle$ و $|j_2,m_2\rangle$ التي هي توابع خاصة مشتركة للموءثرات $\hat{J}^2(1)$ و $\hat{J}^2(2)$ و $\hat{J}_z$ أي :

$$|j_1,j_2,j,m\rangle = \sum_{m_1,m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2|j m\rangle\, |j_1,m_1\rangle|j_2,m_2\rangle \qquad (9)$$

حيث تعبر العوامل $\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j,m\rangle$ عن الوزن الاحصائي للحالات المختلفة المشتركة في الجمع وتسمى عوامل الجمع الشعاعي أو عوامل كليبشي – غوردان وهي ، كما نلاحظ من (9) ، توءلف عناصر مصفوفة التحويل من القاعدة $|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle$ الى القاعدة $|j_1,j_2,j,m\rangle$ وقد يرمز

لهذه العوامل برمز يختلف قليلاً في بعض المراجع الأخرى فتكتب مثلاً: $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j m \rangle$ كما يعبر عنها أحياناً بواسطة ما يسمى بالرمز $3j$ الذي سنتعرض له في نهاية هذه الفقرة .

تلعب عوامل الجمع الشعاعي دورا هاما في الفيزياء الذرية والنووية وفي كثير من تطبيقات ميكانيك الكم الأخرى ولذلك سنورد أهم خواصها فيما يلي :

نلاحظ أولاً أنها تنعدم عندما لاتتحقق العلاقة :

$$m = m_1 + m_2 \qquad (١٥)$$

وبالتالي فان الجمع السابق في (٩) سيكون عملياً بأحد الوسيطين m_1 أو m_2 اذا أعطى m ، ولمعرفة عدد القيم التي يمكن أن يأخذها j ندرس أولاً القيم الممكنة للعدد m فنلاحظ من (١٥) أن القيمة العظمى لـ m هي $j_1 + j_2$ وذلك لأن أكبر قيمة لـ m يجب أن تقابل أكبر قيمة لـ m_1 (أي j_1) وأكبر قيمة لـ m_2 (أي j_2) وهكذا فان التابع الخاص المقابل هو $|j_1, j_2, j_1, j_2\rangle$ والقيمة المقابلة لـ j هي $j_1 + j_2$.

أما عندما نأخذ القيمة التالية لـ m (أصغر بواحد) أي $m = j_1 + j_2 - 1$ فيشترك بالجمع (٩) التابعين $|j_1, j_2 - 1\rangle$ و $|j_1 - 1, j_2\rangle$ وهذا يقابل قيمتين لـ j أيضا هما : $j_1 + j_2 - 1$ و $j_1 + j_2$ (اذ لايمكن لـ j أن تكون أصغر من مسقطها وبالتالي فهناك قيمتان فقط)أما اذا أخذنا القيمة التالية لـ m وهي $m = j_1 + j_2 - 2$ فنجد بسهولة أنها تحوي مجموعة مؤلفة من ثلاثة توابع تشترك بالجمع (٩) وهي :

$$|j_1, j_2, j_1 - 2, j_2\rangle \; , \; |j_1, j_2, j_1 - 1, j_2 - 1\rangle \; , \; |j_1, j_2, j_1, j_2 - 2\rangle$$

وهذا يقابل طبعا ثلاث قيم لـ j هي :

$$j_1 + j_2 \; , \; j_1 + j_2 - 1 \; , \; j_1 + j_2 - 2$$

واذا تابعنا هذه العملية فاننا سنصل الى الحد الذي تكون فيه اما $m_1 = -j_1$ أو $m_2 = -j_2$ وهذه يجب أن تقابل القيمة الصغرى لـ j

(اذ لايمكن لـ m_1 أو m_2 أن تنقصا بعدئذ) ، وهكذا تكون القيمة الصغرى لِ j (التي يجب أن تكون موجبة) هي $|j_1 - j_2| = j$ أي أن j يجب أن تحقق ما يسمى شرط المثلث التالي :

$$j_1 + j_2 \geqslant j \geqslant |j_1 - j_2| \qquad (11)$$

وبما أن عوامل كليبش - غوردان هي مصفوفات التحويل من قاعدة الى أخرى فيجب أن تحقق شرطي التوحيد والتعامد التاليين:

$$\left.\begin{aligned} \sum_{j,m} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j\, m \rangle \langle j_1, j_2, m'_1, m'_2 | j, m \rangle &= \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \\ \sum_{m_1, m_2} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m \rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j', m' \rangle &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} \end{aligned}\right\} \qquad (12)$$

وهذا ما يعبر عن واحدية التحويل.وفي حالة التحويل العكسي(أي من القاعدة $\langle j_1, j_2, j, m|$ الى $|j_1, j_2, m_1 m_2\rangle$) فيمكن استعمال المصفوفة نفسها طالما أن العوامل السابقة حقيقية أي :

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = \sum_{j,m} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m \rangle \, |j_1, j_2, j, m\rangle \qquad (13)$$

تسمح الخواص التناظرية لعلاقة المثلث التي تحققها الأعداد الكوانتية الثلاثة j_1, j_2, j باجراء بعض التحولات في عوامل الجمع الشعاعي فمثلاً بتغيير موضعي كل من j_1, j_2 ومسقطيهما نجد :

$$\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - j} \langle j_2, j_1, m_2, m_1 | j, m \rangle$$

وبالتالي نستنتج العلاقة التالية بين التابعين المقابلين :

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - j} \, |j_2, j_1, j, m\rangle \qquad (14)$$

ونورد أخيراً بعض العلاقات الهامة التي تستخدم لحساب عوامل الجمع الشعاعي (علماً أننا أوردنا في نهاية هذا الملحق قيم عوامل كليبش - غوردان المقابلة لمجموع عزمين مختلفين) :

$$\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m \rangle = (-1)^{j_1+j_2-j} \langle j_1, j_2, -m_1, -m_2 | j, -m \rangle$$
$$= (-1)^{j_2+m_2} \sqrt{\frac{2j+1}{2j_1+1}} \langle j, j_2, -m, m_2 | j_1, -m_1 \rangle$$
$$= (-1)^{j_1-m_1} \sqrt{\frac{2j+1}{2j_2+1}} \langle j_1, j, m_1, -m | j_2, m_2 \rangle \qquad (15)$$

وكثيراً ما نستخدم العلاقات التالية في الحسابات البسيطة لعوامـــل الجمع الشعاعي :

$$\langle j_1, j, m_1, -m | 0, 0 \rangle = (-1)^{j-m} \frac{\delta_{j_1 j}}{\sqrt{2j+1}} \qquad (16)$$

$$\langle j, 0, m, 0 | j, m \rangle = \langle j_1, j_2, j_1, j_2 | j_1+j_2, j_1+j_2 \rangle = 1 \qquad (17)$$

$$\langle j, 1, m, 0 | j, m \rangle = \frac{m}{\sqrt{j(j+1)}} \qquad (18)$$

$$\langle j, 2, m, 0 | j, m \rangle = \frac{3m^2 - j(j+1)}{\sqrt{j(j+1)(2j-1)(2j+3)}} \qquad (19)$$

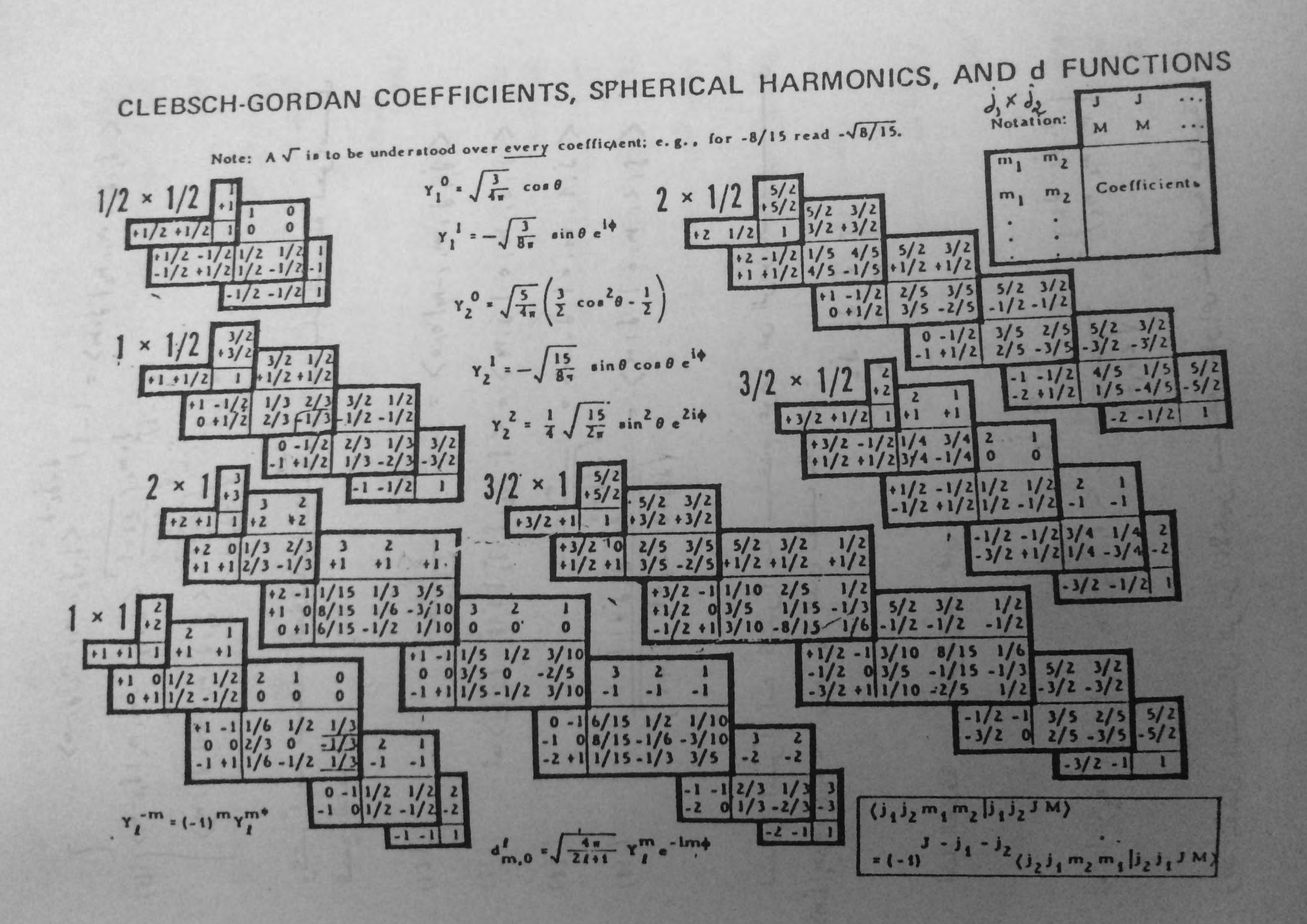
لنذكر أخيراً أنه كثيراً ما يستخدم عوضا عن الرمز السابـــــق $\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m \rangle$ الرمز $3j$ الذي يكتب بالشكل :

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

أما العلاقة بين الرمزين فهي :

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2-j_3}}{\sqrt{2j_3+1}} \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_3, -m_3 \rangle \qquad (20)$$

وقد يفضل استعمال الرمز الأخير لتمتعه بخواص تناظرية عالية .



CLEBSCH-GORDAN COEFFICIENTS, SPHERICAL HARMONICS, AND d FUNCTIONS

Note: A $\sqrt{\ }$ is to be understood over <u>every</u> coefficient; e.g., for -8/15 read $-\sqrt{8/15}$.

Notation: $j_1 \times j_2$

		J	J	...
		M	M	...
m_1	m_2	Coefficients		
m_1	m_2			
.	.			

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\phi}$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right)$$

$$Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi}$$

$$Y_2^2 = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta\, e^{2i\phi}$$

1/2 × 1/2

m_1	m_2	J=1, M=+1
+1/2	+1/2	1

m_1	m_2	J=1, M=0	J=0, M=0
+1/2	-1/2	1/2	1/2
-1/2	+1/2	1/2	-1/2

m_1	m_2	J=1, M=-1
-1/2	-1/2	1

1 × 1/2

m_1	m_2	J=3/2, M=+3/2
+1	+1/2	1

m_1	m_2	J=3/2, M=+1/2	J=1/2, M=+1/2
+1	-1/2	1/3	2/3
0	+1/2	2/3	-1/3

m_1	m_2	J=3/2, M=-1/2	J=1/2, M=-1/2
0	-1/2	2/3	1/3
-1	+1/2	1/3	-2/3

m_1	m_2	J=3/2, M=-3/2
-1	-1/2	1

2 × 1/2

m_1	m_2	J=5/2, M=+5/2
+2	1/2	1

m_1	m_2	J=5/2, M=+3/2	J=3/2, M=+3/2
+2	-1/2	1/5	4/5
+1	+1/2	4/5	-1/5

m_1	m_2	J=5/2, M=+1/2	J=3/2, M=+1/2
+1	-1/2	2/5	3/5
0	+1/2	3/5	-2/5

m_1	m_2	J=5/2, M=-1/2	J=3/2, M=-1/2
0	-1/2	3/5	2/5
-1	+1/2	2/5	-3/5

m_1	m_2	J=5/2, M=-3/2	J=3/2, M=-3/2
-1	-1/2	4/5	1/5
-2	+1/2	1/5	-4/5

m_1	m_2	J=5/2, M=-5/2
-2	-1/2	1

3/2 × 1/2

m_1	m_2	J=2, M=+2
+3/2	+1/2	1

m_1	m_2	J=2, M=+1	J=1, M=+1
+3/2	-1/2	1/4	3/4
+1/2	+1/2	3/4	-1/4

m_1	m_2	J=2, M=0	J=1, M=0
+1/2	-1/2	1/2	1/2
-1/2	+1/2	1/2	-1/2

m_1	m_2	J=2, M=-1	J=1, M=-1
-1/2	-1/2	3/4	1/4
-3/2	+1/2	1/4	-3/4

m_1	m_2	J=2, M=-2
-3/2	-1/2	1

2 × 1

m_1	m_2	J=3, M=+3
+2	+1	1

m_1	m_2	J=3, M=+2	J=2, M=+2
+2	0	1/3	2/3
+1	+1	2/3	-1/3

m_1	m_2	J=3, M=+1	J=2, M=+1	J=1, M=+1
+2	-1	1/15	1/3	3/5
+1	0	8/15	1/6	-3/10
0	+1	6/15	-1/2	1/10

m_1	m_2	J=3, M=0	J=2, M=0	J=1, M=0
+1	-1	1/5	1/2	3/10
0	0	3/5	0	-2/5
-1	+1	1/5	-1/2	3/10

m_1	m_2	J=3, M=-1	J=2, M=-1	J=1, M=-1
0	-1	6/15	1/2	1/10
-1	0	8/15	-1/6	-3/10
-2	+1	1/15	-1/3	3/5

m_1	m_2	J=3, M=-2	J=2, M=-2
-1	-1	2/3	1/3
-2	0	1/3	-2/3

m_1	m_2	J=3, M=-3
-2	-1	1

3/2 × 1

m_1	m_2	J=5/2, M=+5/2
+3/2	+1	1

m_1	m_2	J=5/2, M=+3/2	J=3/2, M=+3/2
+3/2	0	2/5	3/5
+1/2	+1	3/5	-2/5

m_1	m_2	J=5/2, M=+1/2	J=3/2, M=+1/2	J=1/2, M=+1/2
+3/2	-1	1/10	2/5	1/2
+1/2	0	3/5	1/15	-1/3
-1/2	+1	3/10	-8/15	1/6

m_1	m_2	J=5/2, M=-1/2	J=3/2, M=-1/2	J=1/2, M=-1/2
+1/2	-1	3/10	8/15	1/6
-1/2	0	3/5	-1/15	-1/3
-3/2	+1	1/10	-2/5	1/2

m_1	m_2	J=5/2, M=-3/2	J=3/2, M=-3/2
-1/2	-1	3/5	2/5
-3/2	0	2/5	-3/5

m_1	m_2	J=5/2, M=-5/2
-3/2	-1	1

1 × 1

m_1	m_2	J=2, M=+2
+1	+1	1

m_1	m_2	J=2, M=+1	J=1, M=+1
+1	0	1/2	1/2
0	+1	1/2	-1/2

m_1	m_2	J=2, M=0	J=1, M=0	J=0, M=0
+1	-1	1/6	1/2	1/3
0	0	2/3	0	-1/3
-1	+1	1/6	-1/2	1/3

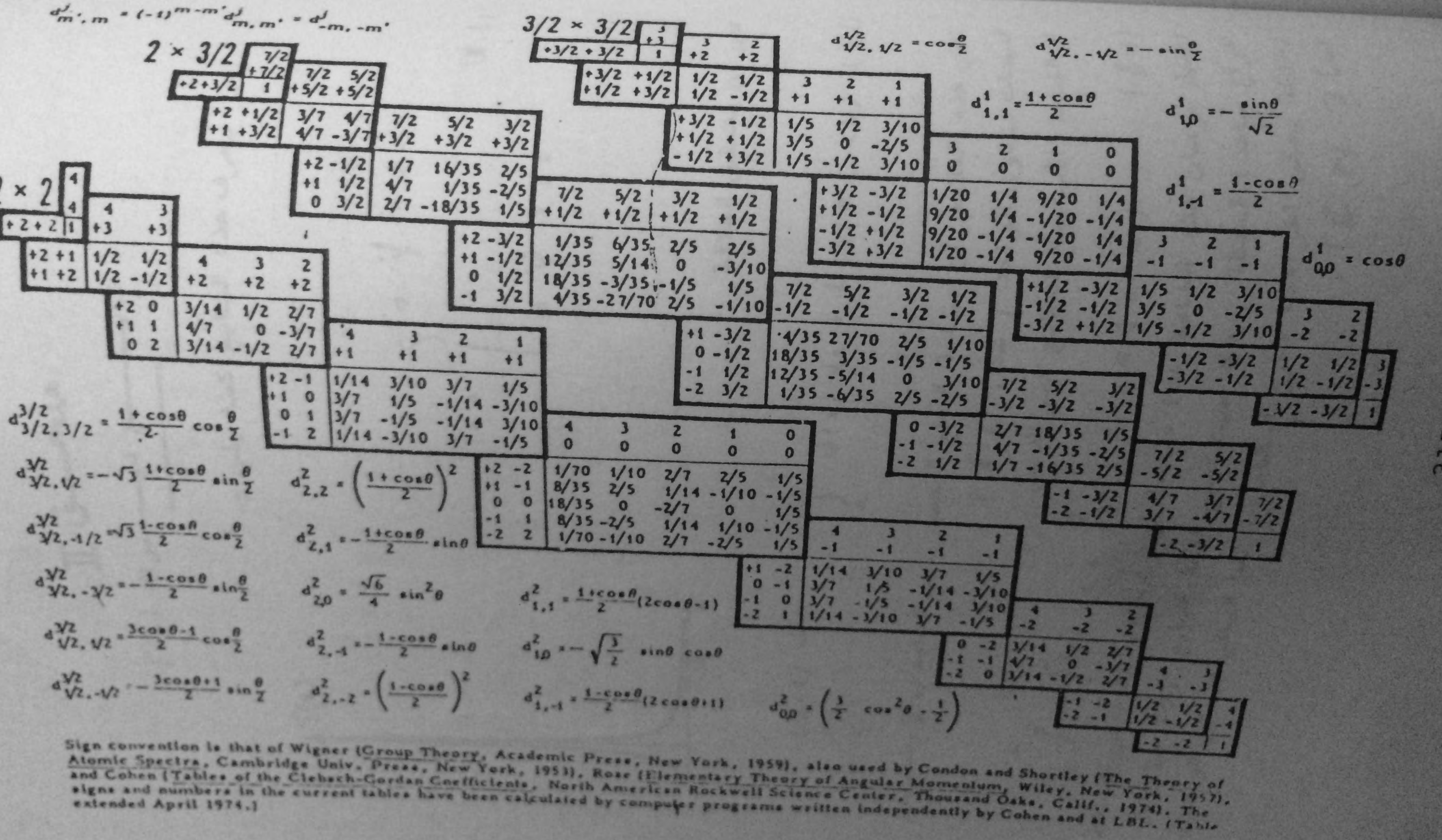
m_1	m_2	J=2, M=-1	J=1, M=-1
0	-1	1/2	1/2
-1	0	1/2	-1/2

m_1	m_2	J=2, M=-2
-1	-1	1

$$Y_\ell^{-m} = (-1)^m Y_\ell^{m*}$$

$$d^\ell_{m,0} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}}\, Y_\ell^m e^{-im\phi}$$

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 J M\rangle = (-1)^{J-j_1-j_2}\langle j_2 j_1 m_2 m_1 | j_2 j_1 J M\rangle$$



$d^j_{m',m} = (-1)^{m-m'} d^j_{m,m'} = d^j_{-m,-m'}$

3/2 × 3/2

	3
	+3
+3/2 +3/2	1

	3	2
	+2	+2
+3/2 +1/2	1/2	1/2
+1/2 +3/2	1/2	-1/2

	3	2	1
	+1	+1	+1
+3/2 -1/2	1/5	1/2	3/10
+1/2 +1/2	3/5	0	-2/5
-1/2 +3/2	1/5	-1/2	3/10

	3	2	1	0
	0	0	0	0
+3/2 -3/2	1/20	1/4	9/20	1/4
+1/2 -1/2	9/20	1/4	-1/20	-1/4
-1/2 +1/2	9/20	-1/4	-1/20	1/4
-3/2 +3/2	1/20	-1/4	9/20	-1/4

	3	2	1
	-1	-1	-1
+1/2 -3/2	1/5	1/2	3/10
-1/2 -1/2	3/5	0	-2/5
-3/2 +1/2	1/5	-1/2	3/10

	3	2
	-2	-2
-1/2 -3/2	1/2	1/2
-3/2 -1/2	1/2	-1/2

	3
	-3
-3/2 -3/2	1

$d^{1/2}_{1/2,1/2} = \cos\frac{\theta}{2}$ $\qquad d^{1/2}_{1/2,-1/2} = -\sin\frac{\theta}{2}$

$d^1_{1,1} = \frac{1+\cos\theta}{2}$ $\qquad d^1_{1,0} = -\frac{\sin\theta}{\sqrt{2}}$

$d^1_{1,-1} = \frac{1-\cos\theta}{2}$

$d^1_{0,0} = \cos\theta$

2 × 3/2

	7/2
	+7/2
+2 +3/2	1

	7/2	5/2
	+5/2	+5/2
+2 +1/2	3/7	4/7
+1 +3/2	4/7	-3/7

	7/2	5/2	3/2
	+3/2	+3/2	+3/2
+2 -1/2	1/7	16/35	2/5
+1 +1/2	4/7	1/35	-2/5
0 +3/2	2/7	-18/35	1/5

	7/2	5/2	3/2	1/2
	+1/2	+1/2	+1/2	+1/2
+2 -3/2	1/35	6/35	2/5	2/5
+1 -1/2	12/35	5/14	0	-3/10
0 +1/2	18/35	-3/35	-1/5	1/5
-1 +3/2	4/35	-27/70	2/5	-1/10

	7/2	5/2	3/2	1/2
	-1/2	-1/2	-1/2	-1/2
+1 -3/2	4/35	27/70	2/5	1/10
0 -1/2	18/35	3/35	-1/5	-1/5
-1 +1/2	12/35	-5/14	0	3/10
-2 +3/2	1/35	-6/35	2/5	-2/5

	7/2	5/2	3/2
	-3/2	-3/2	-3/2
0 -3/2	2/7	18/35	1/5
-1 -1/2	4/7	-1/35	-2/5
-2 +1/2	1/7	-16/35	2/5

	7/2	5/2
	-5/2	-5/2
-1 -3/2	4/7	3/7
-2 -1/2	3/7	-4/7

	7/2
	-7/2
-2 -3/2	1

2 × 2

	4
	4
+2 +2	1

	4	3
	+3	+3
+2 +1	1/2	1/2
+1 +2	1/2	-1/2

	4	3	2
	+2	+2	+2
+2 0	3/14	1/2	2/7
+1 1	4/7	0	-3/7
0 2	3/14	-1/2	2/7

	4	3	2	1
	+1	+1	+1	+1
+2 -1	1/14	3/10	3/7	1/5
+1 0	3/7	1/5	-1/14	-3/10
0 1	3/7	-1/5	-1/14	3/10
-1 2	1/14	-3/10	3/7	-1/5

	4	3	2	1	0
	0	0	0	0	0
+2 -2	1/70	1/10	2/7	2/5	1/5
+1 -1	8/35	2/5	1/14	-1/10	-1/5
0 0	18/35	0	-2/7	0	1/5
-1 1	8/35	-2/5	1/14	1/10	-1/5
-2 2	1/70	-1/10	2/7	-2/5	1/5

	4	3	2	1
	-1	-1	-1	-1
+1 -2	1/14	3/10	3/7	1/5
0 -1	3/7	1/5	-1/14	-3/10
-1 0	3/7	-1/5	-1/14	3/10
-2 1	1/14	-3/10	3/7	-1/5

	4	3	2
	-2	-2	-2
0 -2	3/14	1/2	2/7
-1 -1	4/7	0	-3/7
-2 0	3/14	-1/2	2/7

	4	3
	-3	-3
-1 -2	1/2	1/2
-2 -1	1/2	-1/2

	4
	-4
-2 -2	1

$d^{3/2}_{3/2,3/2} = \frac{1+\cos\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}$

$d^{3/2}_{3/2,1/2} = -\sqrt{3}\,\frac{1+\cos\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}$

$d^{3/2}_{3/2,-1/2} = \sqrt{3}\,\frac{1-\cos\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}$

$d^{3/2}_{3/2,-3/2} = -\frac{1-\cos\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}$

$d^{3/2}_{1/2,1/2} = \frac{3\cos\theta-1}{2}\cos\frac{\theta}{2}$

$d^{3/2}_{1/2,-1/2} = -\frac{3\cos\theta+1}{2}\sin\frac{\theta}{2}$

$d^2_{2,2} = \left(\frac{1+\cos\theta}{2}\right)^2$

$d^2_{2,1} = -\frac{1+\cos\theta}{2}\sin\theta$

$d^2_{2,0} = \frac{\sqrt{6}}{4}\sin^2\theta$

$d^2_{2,-1} = -\frac{1-\cos\theta}{2}\sin\theta$

$d^2_{2,-2} = \left(\frac{1-\cos\theta}{2}\right)^2$

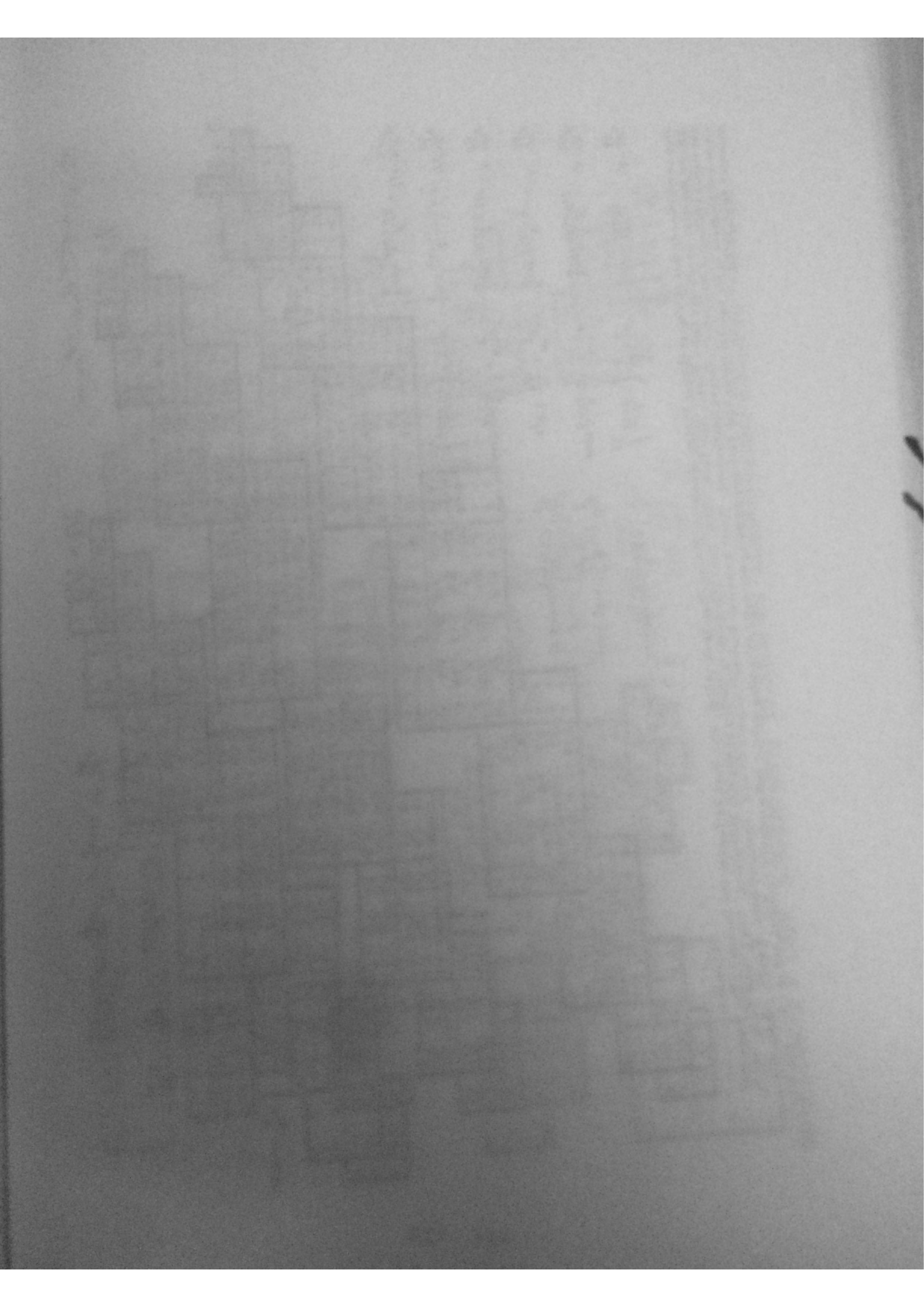
$d^2_{1,1} = \frac{1+\cos\theta}{2}(2\cos\theta-1)$

$d^2_{1,0} = -\sqrt{\frac{3}{2}}\sin\theta\cos\theta$

$d^2_{1,-1} = \frac{1-\cos\theta}{2}(2\cos\theta+1)$

$d^2_{0,0} = \left(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right)$

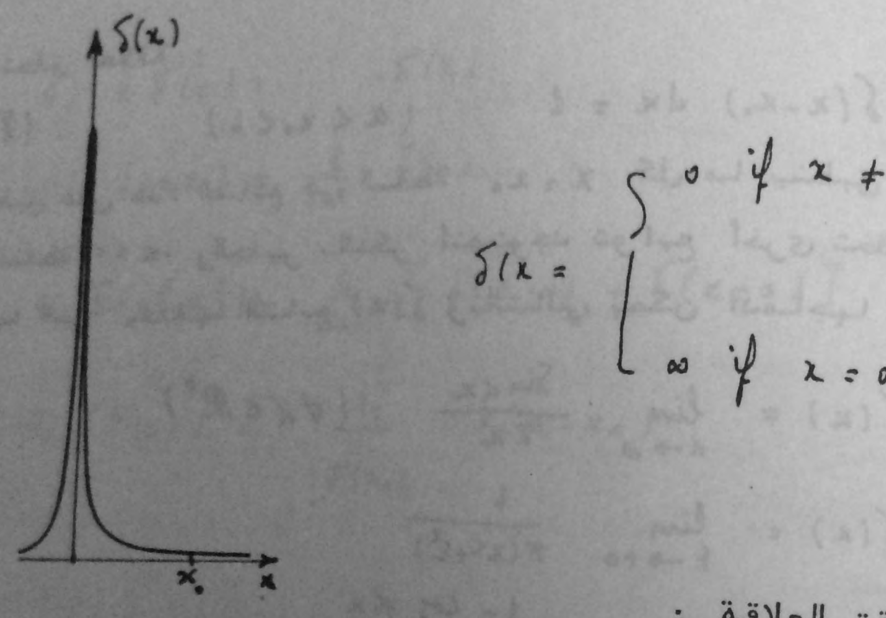
Sign convention is that of Wigner (Group Theory, Academic Press, New York, 1959), also used by Condon and Shortley (The Theory of Atomic Spectra, Cambridge Univ. Press, New York, 1953), Rose (Elementary Theory of Angular Momentum, Wiley, New York, 1957), and Cohen (Tables of the Clebsch-Gordan Coefficients, North American Rockwell Science Center, Thousand Oaks, Calif., 1974). The signs and numbers in the current tables have been calculated by computer programs written independently by Cohen and at LBL. (Table extended April 1974.)



ملحـــق II

تابـــع ديـــراك $\delta(x)$

آ ـ يعرف هذا التابع كما يلي :



$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{if } x \neq 0 \\ \infty & \text{if } x = 0 \end{cases} \qquad (II.1)$$

شكل (II.1)

على أن تتحقق العلاقة :

$$\int_a^b \delta(x)\, dx = 1 \quad ; (a < 0 < b) \qquad (II.2)$$

تعني هذه العلاقة أن مساحة السطح المحصور بين التابع $\delta(x)$ ومحـــور السينات تساوي الواحد (شكل (II.1)) .

ان الخاصة الأساسية لتابع ديراك هي :

$$\int_a^b f(x)\,\delta(x)\, dx = f(0) \quad ; (a < 0 < b) \qquad (II.3)$$

ويسهل برهان هذه الخاصة اذا علمنا أن $f(x)\,\delta(x) = 0$ في كل نقط الفراغ ماعدا النقطة $x = 0$ حيث تصبح قيمة التابع $f(x)$ هي $f(0)$ وعندئذ يمكن اخراجها خارج التكامل ، أما الباقي فيساوي الواحد طبقاً لـ (II.2) .

اذا نقلنا المحور الشاقولي الى النقطة $x = x_0$ فيمكن تعريف التابع $\delta(x-x_0)$ بشكل مشابه لما سبق أي بالشكل :

$$\delta(x-x_0) = \begin{cases} 0 & \text{if} \quad x \neq x_0 \\ \infty & \text{if} \quad x = x_0 \end{cases} \qquad (II.4)$$

مع تحقق العلاقة :

$$\int_a^b \delta(x-x_0)\, dx = 1 \qquad (a < x_0 < b) \qquad (II.5)$$

وينطبق على هذا التابع في النقطة $x = x_0$ كل ما ينطبق على $\delta(x)$ في النقطة $x = 0$. والجدير بالذكر أنه توجد توابع أخرى تحقق الخواص نفسها التي يحققها التابع $\delta(x)$ وبالتالي يمكن ادماجها معه وهي :

1) $\delta(x) = \lim\limits_{\alpha \to \infty} \dfrac{\sin \alpha x}{\pi x} \quad : (\forall \alpha \in R^+)$

2) $\delta(x) = \lim\limits_{\varepsilon \to +0} \dfrac{\varepsilon}{\pi(x^2+\varepsilon^2)}$

3) $\delta(x) = \lim\limits_{x \to \infty} \dfrac{1-\cos \alpha x}{\pi \alpha x^2}$

4) $\delta(x) = \dfrac{1}{2\pi} \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\, dx$

وهنا يمكن تعميم التعريف ليشمل ما يسمى تابع ديراك ثلاثي الابعاد التالي :

$$\delta(\vec{r}) = \delta(x)\,\delta(y)\,\delta(z) = \frac{1}{8\pi^3} \int e^{i\vec{k}.\vec{r}}\, dx\, dy\, dz$$

ب – يتصف تابع ديراك بالخواص التالية، (التي يمكن البرهان على صحتها دون صعوبة)، وهي :

(تابع زوجي)

1) $\delta(x) = \delta(-x)$

2) $x\,\delta(x) = 0$

3) $\delta'(x) = -\delta'(-x)$

حيث $\delta'(x)$ هو مشتق تابع ديراك الذي يعرف بالعلاقة :

$$\int f(x)\, \delta'(x)\, dx = -f'(0)$$

أي أن مشتق تابع ديراك $\delta(x)$ هو التابع $\delta'(x)$ الذي يحقق العلاقة السابقة.

4) $x\,\delta'(x) = -\delta(x)$

5) $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\,\delta(x)$

6) $\delta(x^2-a^2) = \frac{1}{|2a|}\left[\delta(x-a) + \delta(x+a)\right]$

7) $\delta F(x) = \sum_n \frac{1}{F'(x_n)}\,\delta(x-x_0)$

حيث x_n هي جذور التابع $F(x)$.

8) $\int \delta(a-x)\,\delta(x-b)\,dx = \delta(a-b)\ ,\ (a \neq b)$

9) $f(x)\,\delta(x-a) = f(a)\,\delta(x-a)$



دليل المصطلحات العلمية

انكليزي - فرنسي - عربي

انكليزي	فرنسي	عربي
- A -		
Absorption	Absorption	امتصاص
Accidental	Accidentelle	تصادفي
- degeneracy	- (dégénérescence)	تطابق تصادفي
Addition	Addition	جمع
- of angular momenta	- des moments angulaires	جمع العزوم الحركية
Adjoint	Adjoint	مرافق
- of an operator	- (opérateur)	مؤثر مرافق
Amplitude	Amplitude	مطال
Angular momentum	Angulaire (moment)	عزم حركي
Annihilation	Annihilation	فناء
- operator	- (operateur d')	مؤثرالفناء (الهدم)
Asymmetric	Antisymétrique	لامتناظر
Approximation	Approximation	تقريب
- methods	- (méthode d')	طرق التقريب
Atom	Atome	ذرة
- (Hydrogen)	- d'Hydrogène	ذرة الهيدروجين
Average value	Valeur moyenne	القيمة الوسطى
- B -		
Barrier	Barrière	حاجز
- of potential	- de potentiel	حاجز كمون
Basis	Base	قاعدة
- (discrete)	- discrète	قاعدة متقطّعة

English	Français	العربية
— (continuous)	— continue	قاعدة مستمرة
Bessel functions	Bessel (fonctions de)	توابع بيسل
Bose-Einstein statistics	Bose-Einstein (statistique de)	احصاء بوز-انيشتاين
Bosons	Bosons	بوزونات
Bra	Bra	برا
- C -		
Canonical	canoniques	قانوني
— equation of motion	(Equation) — (du mouvement)	المعادلات القانونية للحركة
— variables	— (variables)	متحولات قانونية
Central field	Central (champ)	حقل مركزي
Centre of mass	Centre de masse	مركز الكتلة
Characteristic equation	Caractéristique (equation)	المعادلة المميزة
Classical mechanics	Classique (mécanique)	الميكانيك الكلاسيكي
Clebsch-Gordan — coefficients	Clebsch-Gordan — (coefficients de)	معاملات كليبش — غوردان
Commutation relations	Commutation (relations de)	علاقات التبادل
Conservation	Conservation	انحفاظ
— of angular momentum	— du moment angulaire	انحفاظ العزم الحركي
— of energy	— de l'énergie	انحفاظ الطاقة
— of probability	— de la probabilité	انحفاظ الاحتمال
Continuous spectrum	Continu (spectre)	طيف مستمر
Convergence	Convergence	تقارب
Creation operator	Création (opérateur de)	موءثر الخلق (التكوين)
Current density	Courant (densité de)	كثافة تيار
- D -		
De Broglie relation	De Broglie (relation de)	علاقة دوبروي
Degeneracy	Dégénérescence	انطباق

— of exchange	— d'échange	انطباق التبديل
Delta fuction	Delta (fontion de)	تابع دلتا
Density	Densité	كثافة
— of states	— d'états	كثافة الحالات
Deuterium	Deutérium	دوتيريوم
Determinant of Slater	Déterminant de Slater	معين سلاتر
Diagonal matrix	Diagonale (matrice)	مصفوفة قطرية
Dirac	Dirac	ديراك
— delta function	— (fonction delta de)	تابع دلتا لديراك
— notations	— (notations de)	رموز ديراك
— relativistic equation	— (equation relative de)	معادلة ديراك النسبية
Discrete speltum	Discrét (spectre)	طيف متقطّع
Distribution	Distribution	توزع
— of Bose-Einstèen	— de Bose-Einstein	توزع بوز- اينشتاين
— of Fermi-Dirac	— de Fermi-Dirac	توزع فيرمي — ديراك
Duality	Dualité	مثنوية
— of wave-corpuscle	— onde-corpuscule	مثنوية موجة-جسيمية

- E -

Effect	Effet	مفعول
Eigenequation	Equation caracteristique	المعادلة المميزة
Eigenfunction	Fonction propre	تابع خاص
Eigenvalue	Valeur propre	قيمة خاصة
Eigenvector	Vecteur propre	شعاع خاص
Electromagnetic field	Electromagnétique	حقل كهرطيسي
Electron spin	Electron (spin d')	سبين الالكترون
Elementary particles	Elémantaires (particules)	جسيمات أولية
Energy	Energie	طاقة
— levels	— (niveaux d')	سويات الطاقة

— states	— (états d')	حالات الطاقة
Equation of motion	Equation du mouvement	معادلة الحركة
Exchange degeneracy	Echange (dégénérescence d')	انطباق التبديل
— energy	— (énergie d')	طاقة التبديل
Excitation	Excitation	اثارة
Excited state	Excité (état)	حالة مثارة (مهيجة)
Exclusion principle	Exclusion (principe d')	مبدأ الاستبعاد
-F-		
Fermi-Dirac statistic	Fermi-Dirac (statistiq de)	احصاء فيرمي-ديراك
— distribution	— (distribution de)	توزع فيرمي-ديراك
Fermions	Fermions	فيرميونات
Free particle	Particule libre	جسيم حر
Fundamental stat	Fondamental (état)	حالة دنيا (أساسية)
-G-		
Gauge	Jauge	معيار
Generalizid condinats	Généralisées (coordonnées)	احداثيات معممة
— momentum	Généralisé (moment)	اندفاع معمم
Gerlach : see Stern	Gerlach : voir Stern	غيرلاخ
Ground state	Etat fondamental	حالة دنيا
Group	Groupe	زمرة
Gyromagnetic ration	Gyromagnétique (rapport)	النسبة الجيرومغناطيسية
-H-		
Hamiltonian	Hamiltonien	هاملتوني
— Function	— (fonction)	تابع الهاملتوني
— operator	— (operateur)	موءثر الهاملتوني
— of Dirac	— de Dirac	هاملتوني ديراك
Harmonic oscillator	Harmonique (oscillateur)	هزاز توافقي
Heisenberg	Heisenberg	هايزنبرغ

English	Français	العربية
— picture	— (image de)	صورة هايزنبرغ
— uncertainly principle	— (principe d'incertitude de)	مبدأ عدم التعيين لهايزنبرغ
Helium	Hélium	هليوم
— isotopes	— isotopes	نظائر الهليوم
Hermite polynomials	Hermite (polynôme de)	كثيرات حدود هرميت
Hermitian adjoint	Hermitique (adjoint)	المرافق الهرميتي
— operator	— (operateur)	موءثر هرميتي
Hydrogen atom	Hydrogène (atome d')	ذرة الهيدروجين
Hydrogen-like atom	Hydrogénoides (atomes)	ذرات شبه هيدروجينية
- I -		
Identical particles	Identiques (particules)	جسيمات متطابقة
Impulsion	Impulsion	نبض
Indistinguishable particles	Indiscernables (particules)	جسيمات لامتمايزة
Interaction	Interaction	تفاعل
Invariant	Invariante	لامتغير
- K -		
Ket	Ket	كيت
Kinetic energy	Cinétique (énergie)	طاقة حركية
Kronecker delta	Kronecker (delta de)	دلتا كرونيكر
- L -		
Lagrange's equation	Lagrange (équation de)	معادلة لاغرانج
Lagrangian	Lagrangien	تابع لاغرانج
Landau leveles	Landau (nivaux de)	سويات لانداو
Laguerre polynomials	Laguerre (polynômes de)	كثيرات حدود لاغير
Laplacian operator	Laplacien (opérateur)	موءثر لابلاس
Legendre polynomails	Legendre (polynômes de)	كثيرات حدود ليجاندر
Linear operator	Linéaire (opérateur)	موءثر خطي
- M -		
Magnetic	Magnétique	مغناطيس

- dipole	-(dipôle)	ثنائي أقطاب مغناطيسي
- fielde	-(champ)	حقل مغناطيسي
- moment	-(moment)	عزم مغناطيسي
- quantum number	-(nombre quantique)	عدد كمي مغناطيسي
- resonance	-(résonance)	طنين مغناطيسي
- susceptibility	-(susceptibilité)	طواعية مغناطيسية
Magneton (Bohr)	Magnéton de Bohr	مغنيتون بور
Matrix representation	Matricielle (représentation)	تمثيل مصفوفي
Mean-square deviation	Ecart quadratique moyen	الانحراف التربيعي الوسطي
-N-		
Normalization	Normalisation	تنظيم
Nucleus	Noyau	نواة
-O-		
Observable	Observable	ملحوظ
Operator	Operateur	مؤثر
Hermitian _	- hermitique	مؤثر هرميتي
Linear _	- linéare	مؤثر خطي
Unitary _	- unitaire	مؤثر واحدي
Orthonormal set	Orthonormée (base)	مجموعة متوامدة
-P-		
Parity	Parité	زوجية
Particle	Particule	جسيم
Pauli matrices	Pauli (matrices de)	مصفوفات باولي
Pauli exclusion principle	Pauli (principe d'exclusion de)	مبدأ باولي
Perturbation theory	Perturbation (théorie de)	نظرية الاضطراب
Planck's constant	Planck (constante de)	ثابت بلانك
Plane wave	Plane (onde)	موجة مستوية
Postulate	Postulat	مسلّمة

English	Français	العربية
Potential	Potentiel	كمون
— barrier	— (barrière de)	حاجز كمون
— well	— (puit de)	حفرة كمون
— step	— (marche de)	عتبة كمون
Probability	Probabilité	احتمال

-Q-

English	Français	العربية
Quanta	Quanta	كمات
Quantization	Quantification	تكميم
Quantum numbre principle	nombre quantique principle	العدد الكمي الرئيسي

-R-

English	Français	العربية
Radial	Radial	قطري
— function	— (fonction)	تابع قطري
Relative	Relative	نسبي
Relativistic quantum mechanics	Mécanique quantique relativiste	ميكانيك الكم النسبوي
Representation	Représentation	تمثيل
Resonance	Résonanse	طنين
Rydberg constant	Rydberg (constante de)	ثابت ريدبرغ

-S-

English	Français	العربية
Scalair product	Scalaire (produit)	جداء سلمي
Schrödinger equation	Schrödinger (équation de)	معادلة شرودنغر
Selection rules	Sélection (règles de)	قواعد الانتقاء
Slater (determinant of)	Slater (déterminant de)	معين سلاتر
Spherical harmonics	Shphériques (harmonique)	التوافقيات الكروية
Spectroscopy	Spectroscopie	علم الأطياف
Spectrum (spectra)	Spectre	طيف
Spin	Spin	سبين
— angular momentum	— (moment angulaire de)	العزم الحركي السبيني
State	Etat	حالة

English	Français	العربية
Stern-Gerlach experiment	Stern-Gerlach (expérience de)	تجربة شترن غيرلاخ
Stationary state	Stationnaire (état)	حالة مستقرة
Structure	Structure	بنيـة
statistical distribution	Statistique (distribution)	توزع احصائي
Superposition	Superposition	تراكب
System	Système	جملة
-T-		
Tensor	Tenseur	تنسور
Translation	Translation	انسحاب
Tunnel	Tunnel	نفق
- effect	-(effet)	ظاهرة النفق
-U-		
Unitary	Unitaire	واحدي
- operator	-(opérateur)	موءثر واحدي
-V-		
Valence	Valence	تكافوء
- electron	-(electron de)	الكترون التكافوء
Variational methodes	Variationnelles (méthodes)	طرائق التغيير
Vector	Vecteur	شعاع
Virial theory	Viriel (théorème de)	نظرية فيريال
-W-		
Wave	Onde	موجه
- equation	-(équation d')	معادلة الموجه
- fuction	-(fonction d')	تابع الموجه
-Z-		
Zeeman effect	Zeeman (effet)	مفعول زيمان

المراجع

1 ـ ميكانيك الكم I ـ د. قيصر فيازمنيسكي ـ جامعة حلب 1983.

2 ـ ميكانيك الكم II ـ د. قيصر فيازمنيسكي ـ جامعة حلب 1986.

3 ـ المدخل الى ميكانيك الكم ـ د. محمد أنور بطل ـ جامعة حلب 1987.

4 ـ أسس ميكانيك الكم ـ د. مالك علي ـ جامعة البعث 1989ـ 1990.

5 ـ المدخل الى الميكانيك الكوانتي ـ د. عدنان المحاسب ـ جامعة دمشق 1966.

6- Mécanique Quantique I et II, C.C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Hermann, Paris 1973.

7- Mécanique Quantique thermodynamique, N. Hulin-Jung, J. Klein Hermann, Paris 1972.

8- Le Cours de Physique de Feynman (Mécanique Quantique), R. Feynman, R. Leighton, M. Sands, InterEditions, Paris 1979.

9- Mécanique Quantique (théorie non relativiste), L. Landau, E. Lifchitz, Editions Mir, Moscou 1974.

10- Mécanique Quantique Relativiste (1ère partie), L. Landau, E. Lifchitz, Editions Mir, Moscou 1972.

11- Mécanique Quantique Relativiste (2ème partie), L. Landau, E. Lifchitz, Editions Mir, Moscou 1973.

12- Quantique Rudiments, J.-M. Lévy-Leblond, F. Balibar, InterEditions, Paris 1984.

13- Photons et Atomes (Introduction à l'électrodynamique Quantique), C.C. Tannoudji, J. Dupont, G. Grynberg, InterEditions/Editions du CNRS, Paris 1987.

14- Невзглядов В.Г Теоретическая механика 1959

15- Бутенин Н.В и др Курс теоретической механики 1971

16- Кильчевский Н.А Курс теоретической механики 1977

17- Бухгольц Н.Н Основной курс теоретической механики 19[illegible]

18- Ландау Л.Д и Лифшиц Е.М Механика 1965

19- Воронков И.М Курс теоретической механики 1964

20- Колесников К.С и др Сборник задач по теоретической механике 1983

21- Бать и др — Теоретическая механика в примерах и задачах 1966



المحتوى

الفصل الرابع

العزم الحركي

الفصل الخامس

الحركة في حقل مركزي متناظر

الفصل السادس

الذرة الشبيهة بالهيدروجين

الفصل السابع

الحركة في حقل مغناطيسي - سبين الالكترون

الفصل الثامن

الجسيمات المتطابقة - مبدأ باولي

الفصل التاسع

الطرق التقريبية في ميكانيك الكم

الفصل العاشر

مدخل الى ميكانيك الكم النسبي